

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки 03.03.02 «Физика»

Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Исследование свойств системы титан-водород для структур с дефектами
УДК 669.295:669.788:519.876

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б42	Чжу Юаньсин		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ОЭФ ИЯТШ ТПУ	Чистякова Н.В.	к.ф.-м.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ШИП ТПУ	Черепанова Н.В.	к.ф.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОКД ТПУ	Ларионова Е.В.	к.х.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ОЭФ ТПУ	Лидер А.М.	д.т.н.		

Томск – 2018 г.

Запланированные результаты обучения по программе

Код результата	Результат обучения (выпускник способен)	Требования ФГОС, критериев и/или заинтересованных сторон
<i>Общекультурные компетенции</i>		
P1	Использовать основные этапы и закономерности исторического развития общества, основы философских, экономических, правовых знаний для формирования мировоззренческой, гражданской позиций и использования в различных сферах жизнедеятельности	Требования ФГОСЗ+ (ОК-1, ОК-2, ОК-3, ОК-4)
P2	К самоорганизации и самообразованию, работать в коллективе, к коммуникации в устной и письменной формах, в том числе на иностранном языке, толерантно воспринимать социальные, этические и культурные различия, использовать методы и средства физической культуры, приёмы первой помощи и методы защиты в условиях ЧС.	Требования ФГОСЗ+ (ОК-5, ОК-6, ОК-7, ОК-8, ОК-9)
<i>Общепрофессиональные компетенции</i>		
P3	Использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, современные концепции и ограничения естественных наук, использовать фундаментальные знания разделов общей и теоретической физики, математики для создания моделей и решения типовых профессиональных задач, в том числе с использованием знаний профессионального иностранного языка.	Требования ФГОСЗ+ (ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3, ОПК-7)
P4	Понимать сущность и значение информации, соблюдать основные требования информационной безопасности, использовать методы, способы, средства получения и хранения информации, решать стандартные задачи на основе информационной и библиографической культуры.	Требования ФГОСЗ+ (ОПК-4, ОПК-5, ОПК-6)
P5	Получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах, критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости профиль своей профессиональной деятельности, нести ответственность за последствия своей инженерной деятельности.	Требования ФГОСЗ+ (ОПК-8, ОПК-9)

<i>Профессиональные компетенции</i>		
Р6	<u>Научно-исследовательская деятельность</u> Проводить научные теоретические и экспериментальные исследования в областях: материаловедения, атомной и ядерной физики, водородной энергетики, физики плазмы с помощью современной приборной базы с использованием специализированных знаний физики и освоенных профильных дисциплин.	Требования ФГОСЗ+ (ПК-1, ПК-2)
Р7	<u>Научно-инновационная деятельность</u> Применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований, а также профессиональные знания и умения в результате освоения профильных дисциплин для проведения физических исследований в инновационных областях науки, используя современные методы обработки, анализа и синтеза информации.	Требования ФГОСЗ+ (ПК-3, ПК-4, ПК-5)
Р8	<u>Организационно-управленческая</u> Использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований, участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме, понимать и применять на практике методы управления в сфере природопользования	Требования ФГОСЗ+ (ПК-6, ПК-7, ПК-8)
Р9	<u>Педагогически-просветительская</u> Проектировать, организовывать, анализировать педагогическую деятельность, владеть последовательностью изложения материала с использованием междисциплинарных связей физики с другими дисциплинами, участвовать в информационно-образовательных мероприятиях по пропаганде и распространению научных знаний	Требования ФГОСЗ+ (ПК-9)

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа ядерных технологий
Направление подготовки 03.03.02 «Физика»
Отделение школы (НОЦ) экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель ООП
_____ Лидер А.М.
(Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

**ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы**

В форме:

бакалаврской работы
(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

Группа	ФИО
150Б42	Чжу Юаньсин

Тема работы:

Исследование свойств системы титан-водород для структур с дефектами	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	02.02.2018 г., 618/с

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе</p> <p><i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i></p>	<p>Моделирование структуры титана-водорода с дефектами методом МД.</p>
---	--

<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</p> <p><i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<ul style="list-style-type: none"> – Обзор литературных источников; – Моделирование структуры титана с дефектами; – Моделирование структуры титана с дефектами и водородом; – Расчет параметров для разных дефектов в системе титана-водорода; – Социальная ответственность; – Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение; – Заключение.
<p>Перечень графического материала</p> <p><i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i></p>	
<p>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</p>	
<p>Раздел</p>	<p>Консультант</p>
<p>Социальная ответственность</p>	
<p>Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение</p>	
<p>Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:</p>	

<p>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</p>	
--	--

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ОЭФ ИЯТШ ТПУ	Чистякова Н.В.	к.ф.-м.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б42	Чжу Юаньсин		

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И
РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»**

Студенту:

Группа	ФИО
150Б42	Чжу Юаньсин

Школа	Инженерная школа ядерных технологий	Отделение	Экспериментальная физика
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	03.03.02 Физика

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Определение стоимости ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых информационных и человеческих
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	Знакомство и отбор норм и нормативов расходования ресурсов
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Знакомство с системой налогообложения, со ставками налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ
2. Планирование и формирование бюджета научных исследований	Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет.
3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	Определение ресурсной, финансовой, экономической составляющей

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Оценка конкурентоспособности технических решений
2. Матрица SWOT
3. Альтернативы проведения НИ
4. График проведения и бюджет НИ
5. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	
---	--

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ШИП ТПУ	Черепанова Н.В.	к.ф.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б42	Чжу Юаньсин		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
150Б42	Чжу Юаньсин

Школа	Инженерная школа ядерных технологий	Отделение	Экспериментальная физика
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	03.03.02 Физика

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Производственная безопасность

1.1. Анализ выявленных вредных факторов при разработке и эксплуатации проектируемого решения в следующей последовательности:

- физико-химическая природа вредности, её связь с разрабатываемой темой;
- действие фактора на организм человека;
- приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ);
- предлагаемые средства защиты;
- (сначала коллективной защиты, затем – индивидуальные защитные средства).

1.2. Анализ выявленных опасных факторов при разработке и эксплуатации проектируемого решения в следующей последовательности:

- механические опасности (источники, средства защиты);
- термические опасности (источники, средства защиты);
- электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, молниезащита – источники, средства защиты)

1.1 Характеристика факторов изучаемой производственной среды, описывающих процесс взаимодействия человека с окружающей производственной средой:

- Воздействие электрического напряжения на организм человека;
- Воздействие высокой температуры на организм человека;
- Воздействие химических веществ на дыхательные пути и организм человека в целом;
- Утечка газа из баллона;
- Микроклимат.

1.2 Анализ опасных факторов проектируемой производственной среды:
-электробезопасность (непосредственное питание установки от сети постоянного тока 220 В; средства защиты, предусмотренные конструкцией установки, соблюдение правил и инструкций по электробезопасности при работе);
-термическая опасность (печь нагрева образцов; защита специальной конструкцией установки, изолирующие слои, соблюдение правил безопасности и эксплуатации установки);
-пожаровзрывобезопасность (баллоны с газом; соблюдение правил безопасности и эксплуатации установки).

2. Экологическая безопасность:

- защита селитебной зоны
- анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы);
- анализ воздействия объекта на гидросферу (сбросы);
- анализ воздействия объекта на литосферу (отходы);

2. Факторы рабочего места, влияющие на окружающую среду:

- Выброс в атмосферу рабочего газа;
- Выброс в атмосферу химических веществ;

– разработать решения по обеспечению экологической безопасности со ссылками на НТД по охране окружающей среды.	
3. Безопасность в чрезвычайных ситуациях: <ul style="list-style-type: none"> – перечень возможных ЧС при разработке и эксплуатации проектируемого решения; – выбор наиболее типичной ЧС; – разработка превентивных мер по предупреждению ЧС; – разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий. 	3. Защита в чрезвычайных ситуациях: <ul style="list-style-type: none"> - Утечка газа из баллона; - Возникновение возгорания; - Поражение оператора установки электрическим током; - разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий.
4. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	4. Правовые вопросы обеспечения безопасности

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	
---	--

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	
---	--

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОКД ТПУ	Ларионова Е.В.	к.х.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б42	Чжу Юаньсин		

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Уровень образования бакалавриат

Направление подготовки 03.03.02 «Физика»

Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

Период выполнения _____

Форма представления работы:

бакалаврская работа

(бакалаврская работа, дипломный проект/работа, магистерская диссертация)

**КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН
выполнения выпускной квалификационной работы**

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.03.2017	Аналитический обзор литературы	15
01.09.2017	Построение металлических наночастиц разных форм и размера в программе LAMMPS	15
30.12.2017	Определение температуры плавления металлических и исследование влияние размера на температуру плавления наночастиц	20
30.04.2018	Анализ результатов	15
25.05.2018	Социальная ответственность	15
25.05.2018	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	15
25.05.2018	Заключение	5

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ОЭФ ИЯТШ ТПУ	Чистякова Н.В.	к.ф.-м.н.		

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ОЭФ	Лидер А.М.	д.т.н.		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 79 с., 24 рис., 10 табл., 13 источников, 0 прил.

Ключевые слова: дефекты, моделирование методом молекулярной динамики, система титан-водород.

Объектом исследования является молекулярно-динамическая модель системы титан-водород.

Цель работы – Определение энергетических характеристик структур дефект-водород в титане методом молекулярной динамики.

Используемые установки: программа LAMMPS, OVITO, FAR-MANAGER, Wolfram Mathematica.

В процессе исследования проводились моделирование структура титан-водород с дефектами методом молекулярной динамики.

В результате исследования выявлено, влияние дефектов на свойства системы титан-водород

Область применения: Материаловедение конструкционных материалов.

В будущем планируется исследовать влияние объёмных дефектов на свойства металлов.

Оглавление

Введение	13
1. Метод молекулярной динамики (МД).....	14
1.1 Метод молекулярной динамики (МД).....	14
1.2 Программа для моделирования методом молекулярной динамики: LAMMPS	16
1.3 Визуализация данных	21
2. Влияние дефектов на свойства титана и титановых сплавов. Влияние дефектов на процессы взаимодействия с водородом	22
2.2 Типы дефектов.....	22
2.3 Радиальная функция распределения	27
2.3.1 Определение радиальной функции распределения	27
2.3.2 Определение структуры решетки с помощью радиальной функции распределения	29
2.3.3 Экспериментальные результаты диаграммы RDF	31
3. Моделирование дефектов в системе титан-водород и определение параметров	33
3.1 Построение кристаллических решеток с вакансией и дислокацией титана	33
3.2 Определение параметров диффузии для водорода в структурах с дефектами.	40
Заключение	41
4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	42
Введение	42
4.1 Потенциальные потребители результатов исследования	42
4.2 SWOT-анализ.....	44
4.3 Структура работ в рамках научного исследования.	47
4.4 Определение трудоемкости выполнения работ.....	51
4.5 Разработка графика проведения научного исследования	53
4.6 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)	54

Выводы	59
5. Социальная ответственность	61
5.1 Техногенная безопасность	61
5.2 Региональная безопасность	69
5.3 Организационные мероприятия обеспечения безопасности	69
5.4 Особенности законодательного регулирования проектных решений.....	70
5.5 Безопасность в чрезвычайных ситуациях	72
5.6 Расчет искусственного освещения	73
Список литературы	78

Введение

Реальные материалы обладают структурными дефектами: вакансиями, дислокациями, границами зерен и др. Важно исследовать влияние дефектов структуры на свойства материалов.

Расчеты проведены в программе для моделирования методом молекулярной динамики LAMMPS. Программа разработана в национальной лаборатории Сандия (США) и распространяется свободно.

Титан и титановые сплавы часто используются в качестве конструкционных материалов, особенно в самолетостроении и космонавтике. Водород может легко проникать в материалы и изменять их свойства, поэтому важно подробно изучить процессы, которые происходят при проникновении водорода в титан и происходящие изменения свойств и структуры титана. Кроме того, титан и его сплавы могут быть использованы в качестве материалов для накопления водорода и применяться в водородной энергетике. Чистый титан является одним из превосходных металлов для хранения водорода.

В настоящее время, мало работ, рассматривающих модели диффузии для систем с дефектами на атомном уровне. Поэтому цель данной работы: Определение энергетических характеристик структур дефект-водород в титане методом молекулярной динамики. Для достижения этой цели были решены следующие задачи:

1. Определение энергии образования структур:

- титан – вакансия;

- титан – вакансия - водород;

- титан - краевая дислокация - водород;

2. Определение параметров диффузии для водорода в структурах с дефектами.

1. Метод молекулярной динамики (МД)

1.1 Метод молекулярной динамики (МД)

В этом методе эволюция системы атомов рассчитывается посредством решения системы уравнений динамики, которые записываются для каждого атома. В качестве уравнения динамики в классической МД используется уравнение второго закона Ньютона. Существует также квантовая МД, в ней уравнение движения - уравнение Шредингера.

$$m_i \frac{\vec{r}_i}{r_i} = \sum_{j=1, j \neq i}^N \vec{F}_{ij} \quad (1.1.1)$$

где m_i - масса i -й частицы, $\frac{\vec{r}_i}{r_i}$ - ее ускорение, и \vec{F}_{ij} - сила, действующая на нее.

В методе МД необходимо записать и решить систему таких уравнений для каждого атома моделируемой структуры.

МД является детерминированным методом: если известны начальные координаты и скорость частиц, эволюция системы в принципе может быть описана в любое время. Между тем, МД - это метод статистической физики. Компьютерная вычислительная система находится в $6N$ -мерном фазовом пространстве. Трек ($3N$ координаты и $3N$ импульсов). Однако сама эта траектория не представляет интереса. Целью использования этого метода является создание набора конфигураций, которые распределяются в соответствии с определенным правилом распределения, то есть статистическим набором. Примерами таких множеств являются микроканонический ансамбль, соответствующий распределению вероятности в фазовом пространстве,

сохраняющем энергию, или набор спецификаций (регулярный ансамбль), в которых температура постоянна. Траектория, полученная МД, создает такой набор конфигураций. Поэтому измерение физической величины путем моделирования сводится к различным мгновенным значениям, которые усредняются по величине в различные последовательные моменты. Статистическая физика - это связь между микроскопическим поведением и термодинамикой. При очень больших временных интервалах моделирования можно ожидать, что все точки фазового пространства будут доступны системой по их вероятности, а затем усреднение приведет к термодинамическим величинам. Однако на практике моделирование MD выполняется в течение ограниченного временного интервала, поэтому этот расчет должен выполняться с осторожностью. Через анализ достигается равновесное состояние системы. Таким образом, равновесная термодинамическая величина определяется с помощью МД и, например, изучается фазовая диаграмма материала. Кроме того, MD использовался также для изучения неравновесных процессов, таких как диффузия. Наконец, MD может использоваться для определения равновесной структуры (молекулярная статика, описанная выше, также используется для этой цели), и во многих случаях MD может преодолеть локальный минимум и найти глобальный минимум.

Основные этапы МД моделирования

1. Построение атомной структуры образца
2. Задание потенциала взаимодействия
3. Задание граничных и начальных условий
4. Решение системы уравнений движения [1]

1.2 Программа для моделирования методом молекулярной динамики

LAMMPS

LAMMPS является программой для расчета методом классической молекулярной динамики, она может имитировать ансамбль частиц жидкого, газообразного и твердого состояний. Программа может имитировать все типы атомов, полимеры, биологические, металлические, твердые частицы. LAMMPS может рассчитать на немного частиц, либо больший объем частиц, как миллионы или даже миллиарды частиц. LAMMPS может работать эффективно, как на отдельном процессоре настольном ПК или ноутбуке, так и на многопроцессорном кластере

LAMMPS - это компьютерная программа, которая может заменена и расширен, например, может добавить новое силовое поле, атомная модель, граничные условия, а также диагностические функции.

Обычно в смысле, LAMMPS основан на граничные условия и начальные условия интегрирует уравнения Ньютона атомов и макроскопических множества частиц, которые взаимодействуют друг с другом с помощью близкодействующей силы и далекодействующей силы. На параллельной машине, LAMMPS использует метод пространственного разложения для назначения регионального моделирования, делить пространство моделирования на маленькие трехмерные пространства, каждый из которых может распределиться на один процессор. Между соответствующими процессоры общаются друг с другом и хранят информации атомов «gosht» в границе каждого небольшого пространства. LAMMPS (параллельный случай), обладает наибольшей эффективностью, когда моделирует трехмерные прямоугольные коробчатые системы, которые имеют вблизи однородную плотности.

Функция LAMMPS

1. Может последовательно и параллельно вычислять
2. Распределенная стратегия MPI
3. Разложение и запараллеливание моделирования пространства

4. Открытый исходный код
5. Только один входной скрипт может реализовать один или более аналоговых задач одновременно

Особенность, которой LAMMPS не обладает

1. Графический интерфейс чтобы запустить LAMMPS
2. Инструменты для строительства молекулярных систем
3. Задавать параметры силовых полей автоматически
4. Продуманный анализ результатов моделирования
5. Визуальный результат моделирования
6. Отображение выходных данных

2. Основные части программы и команды LAMMPS

Программа для LAMMPS содержит 5 основных частей:

1. Инициализация
2. Определение структуры и типов атомов
3. Задание потенциала взаимодействия
4. Установка условий для моделирования и вывода данных
5. Запуск моделирования

Инициализация - установка параметров, которые должны быть заданы до создания атомов. Основные команды: *units*, *dimension*, *newton*, *processors*, *boundary*, *atom_style*, *atom_modify*.

Units – команда задает набор единиц измерения. LAMMPS обеспечивает три системы: *lj*, *real*, *metal*

Dimension – команда задает размерность пространства и может принимать только два значения: 3 для трехмерного пространства и 2 для двумерного пространства.

Boundary – команда задает тип граничных условий. Самый распространенный тип – периодические граничные условия, которые позволяют моделировать атомы в объеме. Кроме того, можно задавать различные виды свободных поверхностей.

Atom_style – команда определяет какого вида частицы будут использоваться при моделировании. Например, это могут быть атомы, молекулы, ионы, диполи или просто частицы разной формы.

Кроме того, эти команды покажут LAMMPS, какие поля силы мы используем в моделировании: *pair_style*, *bond_style*, *angle_style*, *dihedral_style*, *improper_style*.

Определение структуры и типов атомов

Кристаллическую решетку и атомы можно определить с помощью следующих команд:

Lattice – команда задает тип решетки

Region – команда задает область пространства

create_box – команда создает область, в котором находятся атомы

create_atoms – команда создает атомы

Задание потенциала взаимодействия

В LAMMPS можно задавать разные потенциалы. С помощью следующих команд мы можем их определить:

pair_style – команда задает тип потенциала

pair_coeff – команда задает коэффициенты

Установка условий для моделирования и вывода данных

В этом разделе определяются команды, которые определяют условия при которых ведется расчет – давление, температура, тип процесса – изохорный, изобарный, изотермический и т.п. Кроме того устанавливается тип вывода данных – переменные, картинки, видео.

Fix – команда задает тип процесса

Thermos – команда устанавливает параметры вывода в процессе расчета

Dump – команда задает вывод данных в файл: видео, цифры, картинки

Запуск моделирования

Run – это основная команда для запуска моделирования

Кроме того, существует команда для МД расчета структуры с минимальной энергией – *minimize*

1. LAMMPS не рассчитывается после чтения все входные файлы, иначе, каждая команда выступает в функции после того, как она прочитана. Обратите внимание, что эффекты следующих команд разные.

```
timestep 0.5
```

```
run 100
```

```
run 100
```

```
и
```

```
run 100
```

```
timestep 0.5
```

```
run 100
```

2. Некоторые команды действительны только в случае другие особые команды уже были определены. Например, если мы хотим установить температуру группы атомов, то на первых нужно использовать команду *group*, в котором определено какие атомы принадлежат к этой группе.

3. В команде В нужно использовать данные, которые установлены в команде А, поэтому мы не можем изменить порядок этих двух команд.

Если форматы входных файлов неправильно, LAMMPS в ходе реализации будет выведено сообщение об ошибке ERROR или WARNING.

Каждая непустая строка входного файла считается команда. Команда LAMMPS записи чувствителен к регистру, но большинство команды и параметры написаны строчными буквами и прописные буквы только используется за исключением редких случаев.

1. Знак & положен после строки команды значит, что команда этой строкой со следующей строкой той же команда.

2. Начальный символ командной строки # представляет процесс выполнения этой строки игнорируется, мы можем использовать его, чтобы написать комментарий.

3. Командной строки разнесены tabs, spaces в отдельных «words», в котором содержат буквы, цифры, знак подчеркивания, или знаки препинания.

4. Первое слово этой строки - это имя команды, слово назад связано с параметрами.

5. Текст пространства в двойных кавычках интегрально в качестве параметра, где # и \$ нет функции как упомянули выше.

Запуск программы из командной строки FAR

После написания текста редактора с командами LAMMPS, можно запустить в командной строке (например программы FAR)

```
Unit style      : metal
Current step    : 10000
Time step       : 0.01
Memory usage per processor = 4.76063 Mbytes
Step Temp Press Lx Ly Lz
10000 154.38882 -425.3192 40.578177 40.578177 40.578177
11000 154.38882 -425.3192 40.578177 40.578177 40.578177
12000 154.38882 -425.3192 40.578177 40.578177 40.578177
13000 154.38882 -425.3192 40.578177 40.578177 40.578177
14000 154.38882 -425.3192 40.578177 40.578177 40.578177
15000 154.38882 -425.3192 40.578177 40.578177 40.578177
16000 154.38882 -425.3192 40.578177 40.578177 40.578177
17000 154.38882 -425.3192 40.578177 40.578177 40.578177
```

Рис. 1. Пример запуска программы

Визуализированы структуры построенных образцов

Для того, чтобы результаты моделирования визуализированы, нам нужно использовать инструмент Mathematica. Результат примера показан внизу.

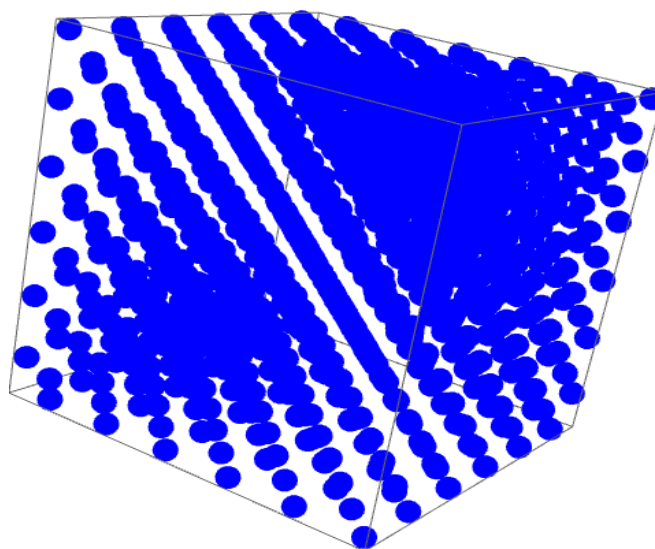


Рис. 2. Картинка построенных образцов без дефектов

1.3 Визуализация данных

OVITO - это научное программное обеспечение для визуализации и анализа данных атомистики и моделирования частиц. Это помогает ученым лучше понять материальные явления и физические процессы.

OVITO разрабатывается Александром Стуковски в Технологическом университете Дармштадта, Германия. Программа является открытым исходным кодом и доступна для всех основных платформ. Он служил во всем большем числе вычислительных симуляционных исследований как полезный инструмент для анализа, понимания и иллюстрации результатов моделирования.

Молекулярная динамика (МД), молекулярная статика и моделирование на основе Монте-Карло в настоящее время являются стандартными методами моделирования материалов с атомным разрешением. Такие атомистические имитационные модели генерируют трехмерные атомные конфигурации или траектории, которые, как правило, необходимо дополнительно анализировать, чтобы генерировать новые научные идеи. Мощные методы анализа и визуализации играют ключевую роль в этом процессе, поскольку имитируемые системы становятся все более сложными. Без правильных программных инструментов ключевая информация останется неоткрытой, недоступной и неиспользуемой. Задача пакетов визуализации, таких как OVITO, состоит в том, чтобы перевести исходные атомные координаты в значимое графическое представление и позволить интерпретацию ученого.

OVITO - свободно доступное программное обеспечение для визуализации и анализа данных для атомистических наборов данных как результат крупномасштабной молекулярной динамики / статистики и моделирования Монте-Карло. Его имя является аббревиатурой для Open Visualization Tool, подчеркивая, что гибкость и расширяемость являются важными целями в разработке этого программного обеспечения. [8]

2. Влияние дефектов на свойства титана и титановых сплавов. Влияние дефектов на процессы взаимодействия с водородом

2.1 Виды дефектов

Точечный дефект: вакансия

Вакансия – дефект кристалла, представляющий собой узел, в котором отсутствует атом (ион). Иначе говоря, вакансия является местом, где в идеальном кристалле должен располагаться атом (ион), но в действительности его в этом положении нет.

Вакансия является самой простой категорией дефекта кристалла. Моделирование вакансии по программу LAMMPS помогает нам лучше познакомимся как работать с программой LAMMPS, и это также сделать базис для моделировать другие дефекты кристалла.

Образование вакансии приводит к повышению энергии кристалла. Энергией образования вакансии называется разность энергий кристалла, содержащего некоторое число N атомов и одну вакансию и кристалла, состоящего из такого же количества атомов N (во втором состоянии имеется в виду идеальный кристалл, то есть, часть бесконечного кристалла, в котором все атомы имеют одну и ту же энергию - ε_0 , равную, с точностью до знака, энергии связи кристалла):

$$E_v = E(N) - E_{cr}(N) = E(N) + N\varepsilon_0 \quad (2.1.1)$$

где $E(N)$ - энергия кристалла с N атомами и вакансией, $E_{cr}(N)$ - энергия кристалла с таким же числом атомов. Энергия $E(N)$ выше, чем $E_{cr}(N)$, поэтому энергия образования вакансии положительна (следует напомнить, что и $E(N)$, и $E_{cr}(N)$ - величины отрицательные).

Важной характеристикой вакансии является ее объем образования V_v - разность объемов кристалла, содержащего определенное число атомов N и

одну вакансию, и идеального кристалла, содержащего то же количество атомов N :

$$V_v = V(N) - V_{cr}(N) = V(N) - NV_a \quad (2.1.2)$$

При удалении атома объем кристалла увеличивается на один атомный объем V_a . Для ГЦК. металлов $V_a = \frac{a^3}{4}$. Однако при релаксации объем уменьшается, поэтому $V_v < V_a$.

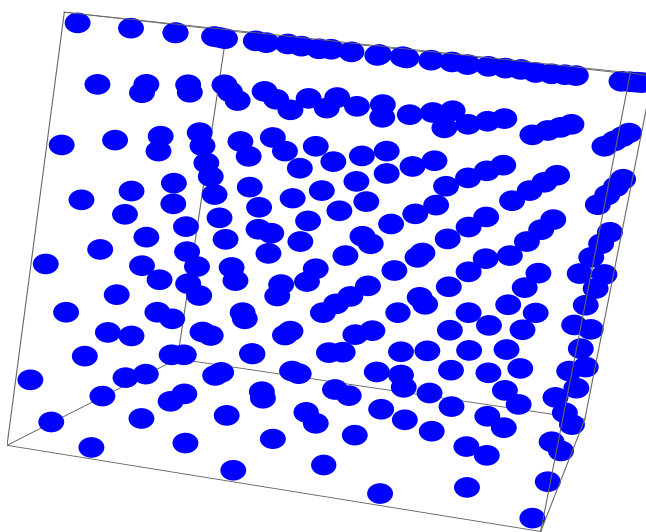


Рис. 3. Картинка построенных образцов с вакансией

С помощью программы LAMMPS, мы можем рассчитать энергию образования вакансии в объёме и объём образования вакансии. Сравнение расчета и экспериментальные данные внизу. [3]

Дислокация: краевая дислокация и винтовая дислокация

Для реальных кристаллов в отличие от идеальных характерно присутствие в них различного рода дефектов строения. Наиболее важный дефект — это дислокация, которая представляет собой линейный дефект [4].

Дислокациями называются дефекты, связанные с нарушением правильной укладки кристаллических плоскостей (рис.3). Существуют два типа дислокаций — краевая и винтовая [4].

Краевая дислокация возникает в том случае, если в кристалле присутствует недостроенная атомная плоскость (рис.3, б). Плоскость 1-2 грани куба в нижней части кристалла не имеет продолжения. Такая незавершённая плоскость называется экстраплоскостью. Её присутствие приводит к тому, что ниже её края кристалл растянут, а выше – сжат. В направлении, перпендикулярном экстраплоскости, над её краем межплоскостное расстояние меньше, а под её краем – больше, чем вдали от дислокации. Таким образом, присутствие краевой дислокации вызывает несовершенства в кристалле в виде изменений межплоскостных расстояний. Область несовершенств простирается вдоль края экстраплоскости, поэтому дислокация, вызвавшая их, называется краевой [4].

Винтовая дислокация возникает там, где атомная плоскость по какой-либо причине закручивается в виде винтовой поверхности (рис.3, в).

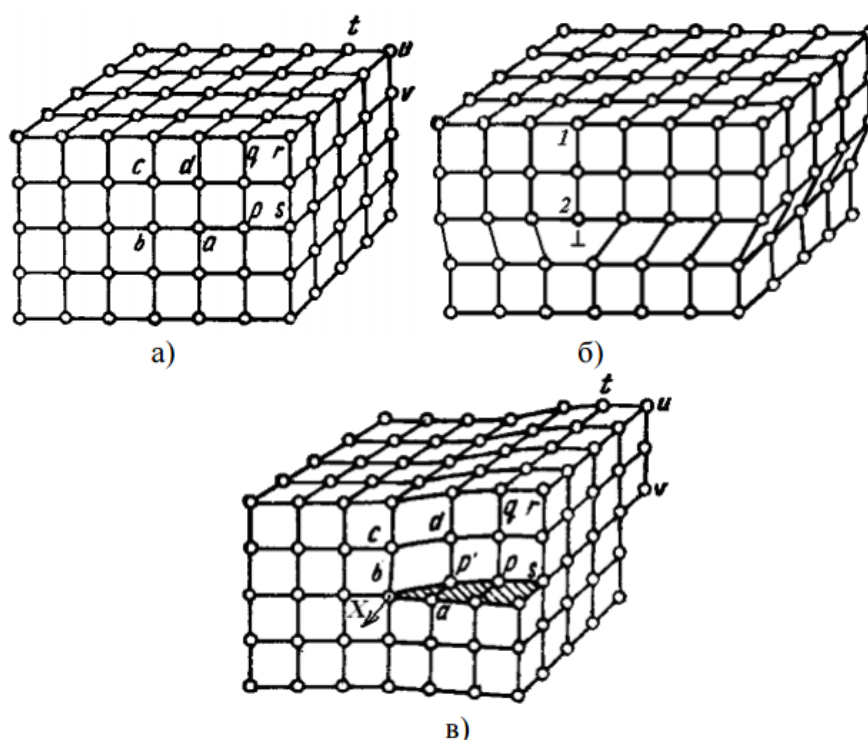


Рис.3. [1] Совершенная простая кубическая пространственная решетка (а), кристаллическая решетка с краевой (б) и винтовой (в) дислокацией в кристалле.

В этом случае несовершенство простирается вдоль оси винта X (рис.3, в) и также сопровождается изменением межплоскостного расстояния. Дислокации

играют огромную роль в кристаллических материалах. Под действием приложенных напряжений они могут легко двигаться по кристаллу. Перемещение одной дислокации приводит к сдвиговой деформации, величина сдвига при этом равна одному межатомному расстоянию. Результатом кооперированного движения большого количества дислокаций является пластическая деформация. Затруднение их движения ведёт к упрочнению материала. Важнейшей характеристикой дислокации является её вектор Бюргерса (вектор смещения), он определяет направление и величину связанного с дислокацией сдвига, меру искажённости а) б) в) Рис. 3. Совершенная простая кубическая пространственная решетка (а), кристаллическая решетка с краевой (б) и винтовой (в) дислокацией в кристалле. кристаллической решётки и энергию дислокации. Вектор Бюргерса (b) определяется как разность контуров, замыкающих ряд атомов в решётке (контуров Бюргерса), проведённых в неискажённой области кристалла и в области, содержащей дислокацию (рис.4) [4].

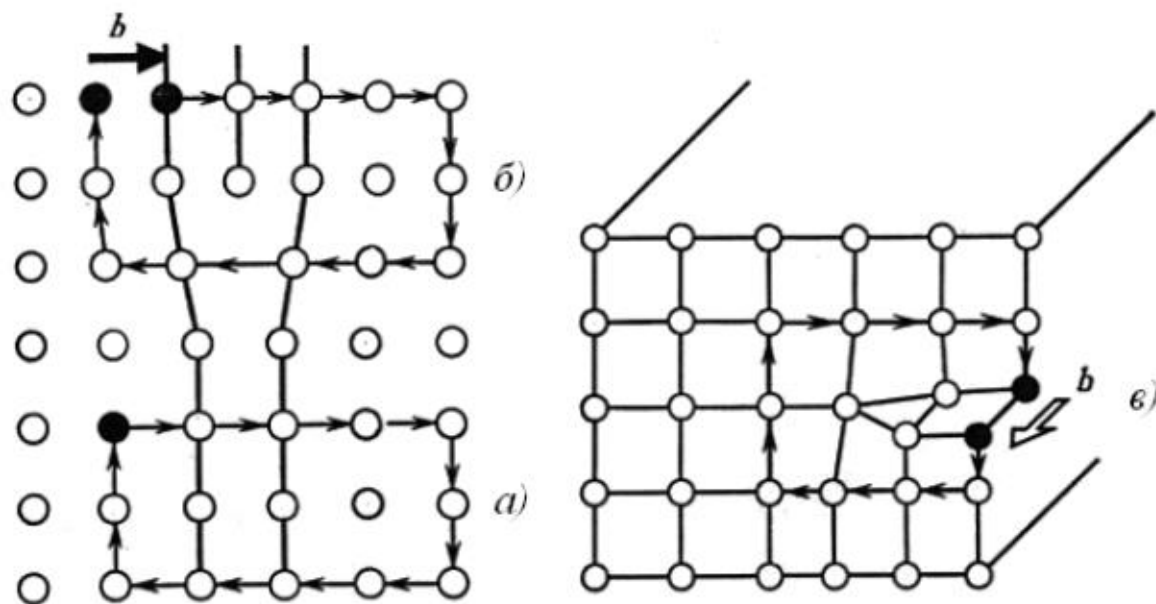


Рис.4. [1] Контур Бюргерса в совершенном кристалле (а), вокруг краевой (б) и винтовой (в) дислокации.

Моделирование дислокаций методом МД

Исследование свойства и динамики дислокацией очень актуально, так как в настоящее время много различных материалах применяются в нашей жизни, и в реальных материалах существуют много дефектов, содержащие дислокации, которые сильно влияют свойства материалов.

Для того чтобы исследовать дислокации, мы используем метод МД моделировать дислокации.

Метод дискретной дислокационной динамики

Для моделирований дислокаций в кристаллической структуре широко применяется метод дискретной дислокационной динамики (ДДД). Метод МД позволяет моделировать системы с небольшими количествами дислокаций. Кроме этого, с помощью метода МД можем описать движение дислокаций. Это позволяет с учетом влияния температуры и с микроскопическими позициями подробно изучить реакции дислокацией. Метод МД позволяет определить соотношения феноменологией, которые дальше используются для описания микроскопических дислокационных явлений более точно в методе ДДД. Формулировка правил описывающее поведение дислокаций в методе ДДД внес вклад в развитие и подход в моделирования дислокаций.

Поведению дислокаций необходимо рассматривать трехмерно. Тем не менее, многие эффекты, в том числе формирование дислокационных структур и неустойчивость однородного распределения дислокаций, могут быть поняты качественно в двухмерных моделях. Мы можем отталкиваться от моделирований дислокаций по методе ДДД в двухмерной постановке [5].

Метод МД используется для определения феноменологических закономерностей динамики краевых дислокаций, которые взаимодействуют в силу потенциала Леннарда–Джонса.

В частности, посредством метода МД мы можем определить эффективную массу дислокации, температурную зависимости коэффициента фононной вязкости при скольжении дислокаций и получить зависимости параметра решетки кристалла от температуры [5].

В технически чистых металлах ловушками, ответственными за захват атомов водорода, являются дефекты кристаллической решетки: точечные дефекты и их комплексы, дислокации, границы зерен, объемные дефекты.

При этом большинство исследователей отмечают, что наиболее эффективными ловушками являются границы зерен, дислокации и вакансии [6]. Взаимодействием водорода с этими дефектами объясняют ряд явлений, связанных с изменением свойств гидрогенизированных металлов, как, например, охрупчивание, изменение подвижности дефектов и вызванное этим изменение характеристик самодиффузии металла. На сегодняшний день остается открытым вопрос относительно количественной оценки сорбционной способности по отношению к водороду различных дефектов кристаллической решетки.

2.3 Радиальная функция распределения

2.3.1 Определение радиальной функции распределения

В статистической механике функция радиального распределения в системе частиц (атом, молекула, коллоид, ...) представляет собой плотность частиц в эталонной частице.

Для однородных и неоднородных систем пусть исходные частицы находятся в начале O , средней плотности частиц и локальной средней плотности времени на расстоянии O . В статистической механике функция радиального распределения (также называемая корреляционной функцией) в системе частиц (атом, молекула, коллоид, ...) представляет собой плотность частиц в эталонной частице.

Функция радиального распределения обычно относится к координатам данной частицы, к вероятности других частиц в распределении пространства (вдали от данных частиц). Таким образом, радиальная функция распределения может быть использована для изучения порядка материи, также может быть использована для описания электронной корреляции.

Функции радиального распределения обычно выражаются как $g(r, r')$.

Для случая $|r-r'|$ относительно мало, $g(r, r')$ в основном характеризуется накоплением атомов и расстоянием между ключами. Для дальнего характера, поскольку вероятность нахождения атомов для данного расстояния по существу одинакова, $g(r, r')$ становится нежным с увеличением $|r-r'|$ и, наконец, стремится к постоянной. В общем случае, когда $g(r, r')$ определено, нормированное условие $|r-r'|$ стремится к бесконечности, $g(r, r')$ стремится к единице. Обычно для кристалла из-за его упорядоченной структуры радиальная функция распределения имеет длинный пик, а для аморфного материала радиальная функция распределения обычно имеет только короткий пик.

Такое же понятие иногда используется для описания корреляции электронов, таких как пара электронов, что дает вероятность появления электрона и других электронов вокруг электрона. Потому что есть кулоновское отталкивание между электронами, и из-за антисимметрии волновой функции, поэтому конкретная форма ассоциации более сложна, аналитического выражения нет. Иногда обменная корреляционная дыра, упоминаемая в литературе, основана на концепции ассоциации. [9]

Предполагая систему количество частиц N , объем V , тогда средняя плотность числа $\rho = N/V$, расстояние между частицами i, j равно r_{ij} . $g(r)$ можно определить по следующей формуле:

$$\rho g(r) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i \sum_{i \neq j} \delta(r - r_{ij}) \right\rangle \quad (2.3.1)$$

Для любой частицы вероятность нахождения другой частицы внутри сферической оболочки определяется следующим образом:

$$P\Delta r = \frac{\rho}{N-1} g(r) \cdot 4\pi r^2 \Delta \quad (2.3.2)$$

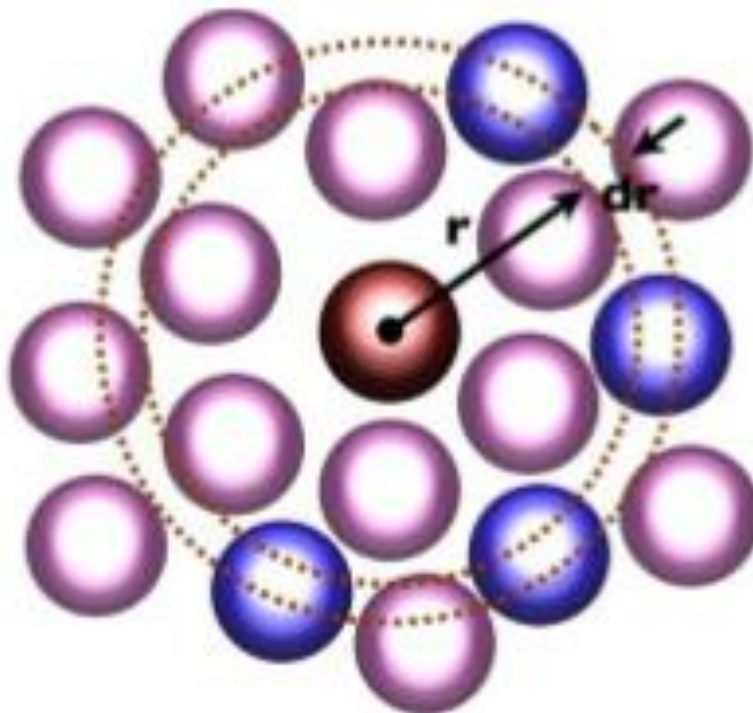


Рис. 4. Двумерная пространственная диаграмма [10]

2.3.2 Определения структуры решетки с помощью радиальной функции распределения

С помощью радиальной функции распределения можно определить структуру материалов. Сначала исследованы нескольких примеров:

Во-первых, выбрано идеальное гексагональное расположение, которое можно найти в слоистой структуре графита. В правильном гексагональном расположении, у каждого правильного шестиугольник шести ближайших смежных правильных шестиугольников соседа и двенадцать следующих ближайших регулярных шестиугольников; каждая вершина правильного шестиугольника заняты три правильных шестиугольника, каждая сторона

заняты два правильных шестиугольника. Предполагая, что любая вершина является «началом координат», расстояние r от ближайшей вершины составляет 1 единицу, а координационное число равно 3. На диаграмме функций радиального распределения появляется первая строка, в следующем рядом с местом, всего шесть вершин, угол между линиями центральной вершины к ближайшей вершине равен 120° , расстояние связи можно вычислить по теореме о косинусе: $\sqrt{(1^2 + 1^2 - 2 \times 1 \times 1 \times \cos 120^\circ)} = \sqrt{3}$. Расстояние между двумя мета-вершинами на трех квадратах, ближайших к центральной вершине, равно $\sqrt{(3^2 + 1^2 - 2 \times 3 \times 1 \times \cos 60^\circ)} = \sqrt{7}$, количество вершины является шестью. Расстояние от центральной вершины равно 3, то число вершин - 6. При $r=2\sqrt{3}$, число вершин равно шести. При $r=\sqrt{13}$, число вершин равно 6. При $r = 4$, число вершин равно трем. Перейдите на внешний слой и так далее.

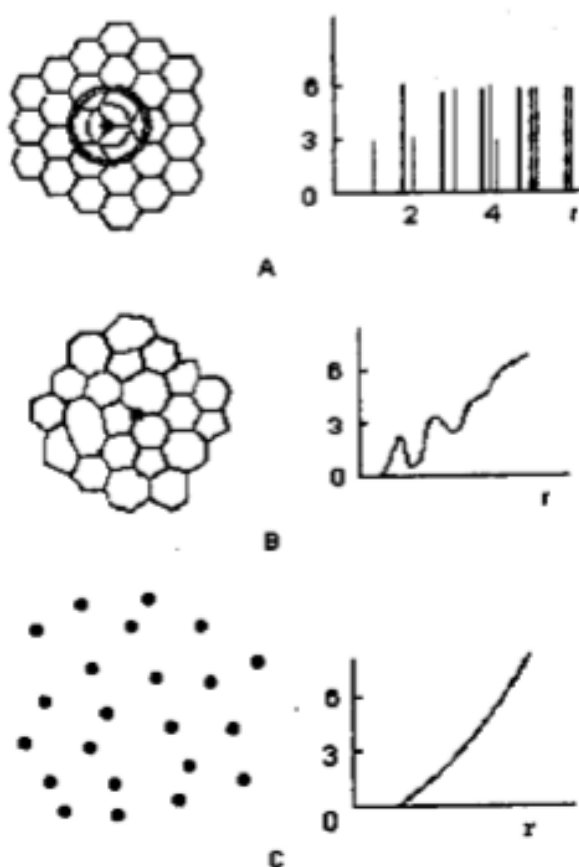


Рис.5. Двумерная диаграмма распределения радиального распределения

A: плоская гексагональная решетка; B: беспорядочное расположение; C: полностью случайное расположение [11]

Переходить к беспорядочной компоновке и ее радиальную функцию распределения в схеме (Рис.5, А). Число ближайшего соседа каждой вершины в графе всегда равно 3. Однако геометрическая особенность трех полигонов, пятиугольников, шестиугольников и гептамов состоит в том, что все ребра уже не имеют одинаковой длины. Поэтому первый пик RDF относительно острый, что указывает на фактическое расположение расстояний ближайших вершин, расположение расстояний соседних вершин, очевидно, больше, что соответствует второму более широкому пику, а затем расстояние распределение более разбросано, переполнено рядом пиков, то есть увеличилась степень беспорядка. Ситуация здесь несколько похожа на ситуацию с аморфным углеродом.

График (Рис.5, С) показывает, что двумерный газ имеет неочищенный RDF и полностью случайный от точки в данной точке. Распределение вероятности плавно возрастает по мере увеличения расстояния, которое называется «неструктурированным». [11]

2.3.3 Экспериментальные результаты диаграммы RDF

В экспериментальной работе, была построены схемы зависимости между $G(r)$ и r в случае без дефектов и с дефектами для алюминия.

Из схем можно определять структуру алюминия – ГЦК структура.

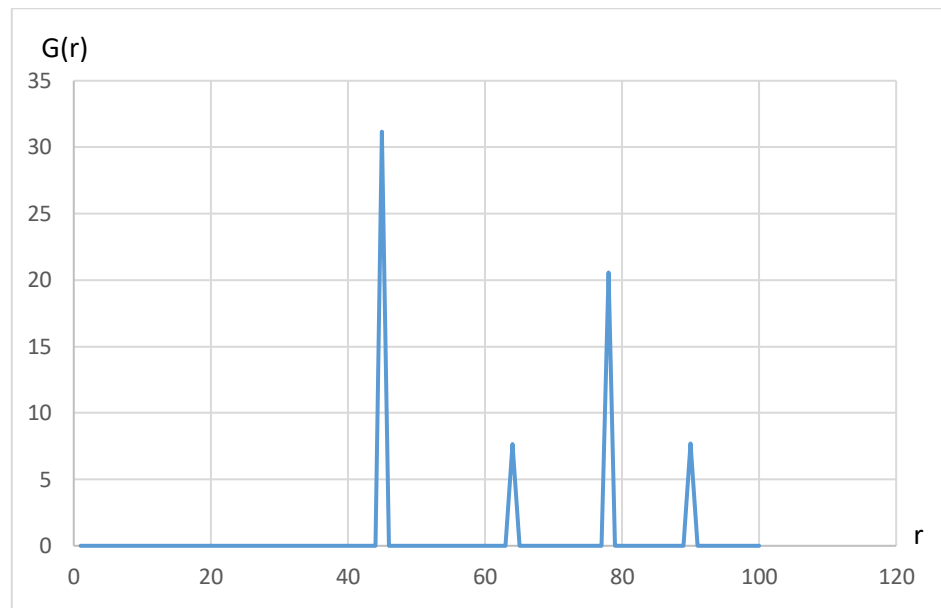


Рис. 6. Зависимость между $G(r)$ и r в случае без дефектов

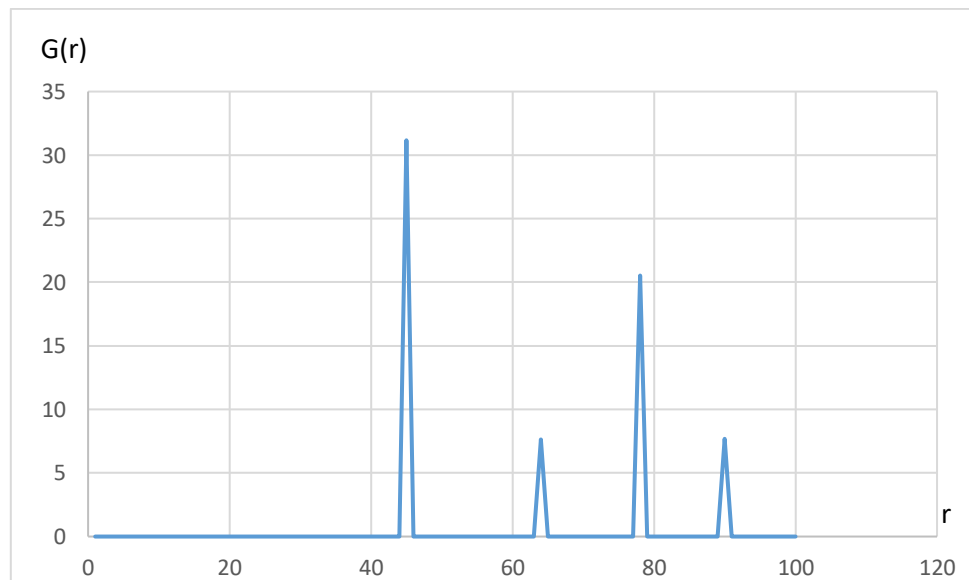


Рис. 7. Зависимость между $G(r)$ и r в случае с вакансией

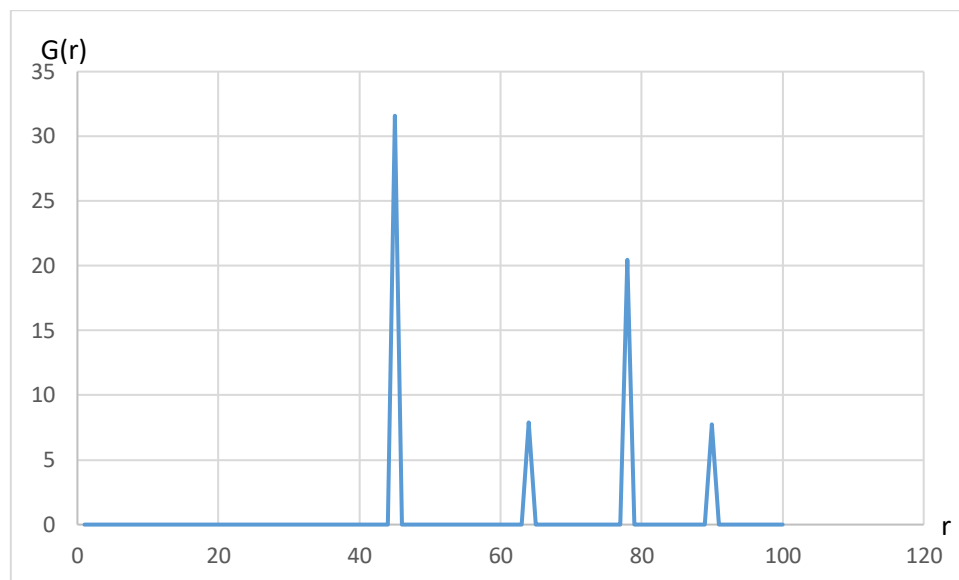


Рис. 8. Зависимость между $G(r)$ и r в случае с дислокацией

В данном результате эксперимента между изображениями идеальной кристаллической структуры и дефектной структуры нет существенной разницы, вероятно, потому что для дефектов функция RDF не может точно определить разницу между реальной структурой и идеальной структурой. Функция радиального распределения может использоваться для изучения материального порядка, также может использоваться для описания электронной корреляции, но не может использоваться для определения структуры дефектов.

3. Моделирование дефектов в системе титан-водород и определение параметров

3.1 Построения кристаллических решеток с вакансией и дислокацией титана

С помощью программы LAMMPS построены структуры титана без дефектов, с вакансией, с дислокацией, и с помощью программы OVITO нарисованы визуальные рисунки, которые показаны вниз.

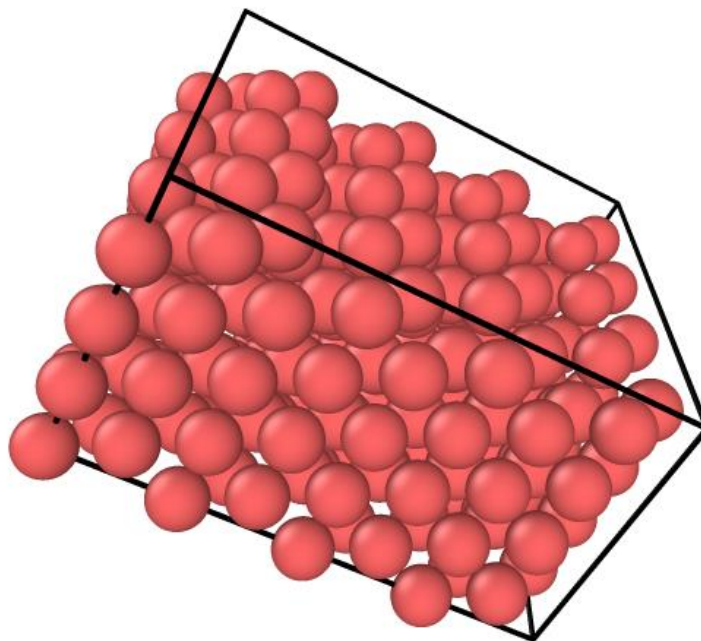


Рис. 9 Структура титана без вакансий

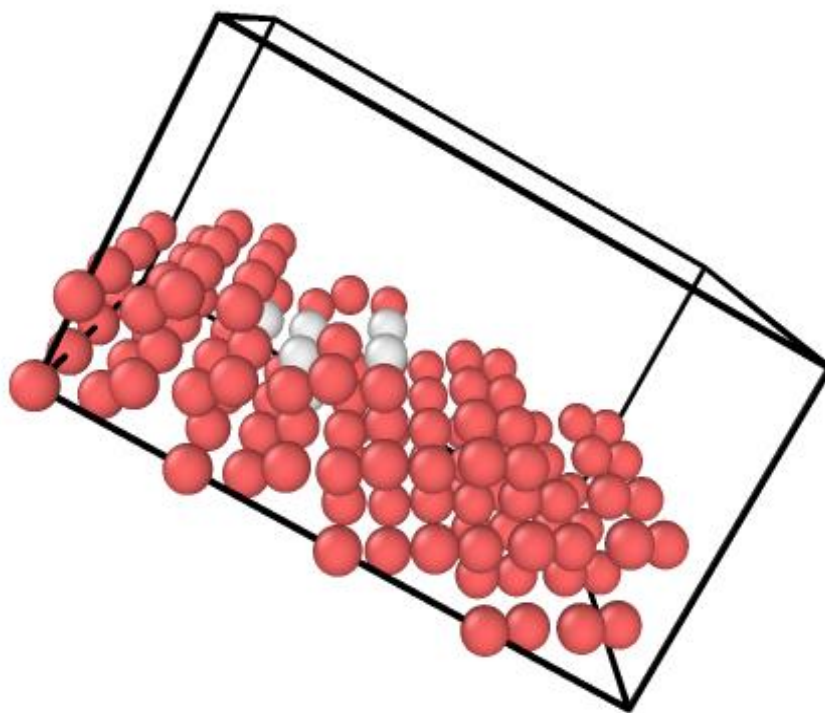


Рис. 10 Структура титана с вакансией

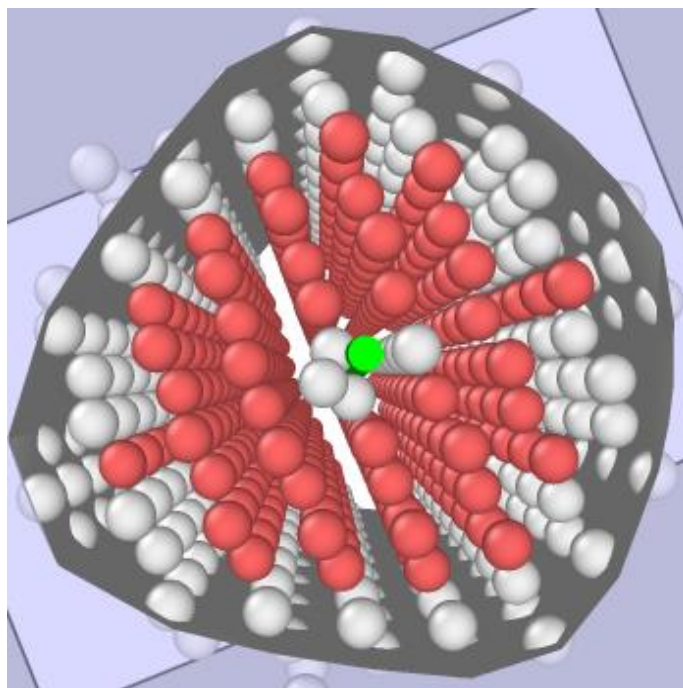


Рис. 11 Структура титана с краевой дислокацией (Вектор Бюргерса: $1/2[-1\ 1\ 0]$)

Энергия образования вакансии определяется по формуле:

$$E_F(N_M, n, m) = E(N_M - n, n, m) - \frac{N_M - n}{N_M} E(N_M, 0, m) \quad (3.1.1)$$

где

E_F — энергия образования вакансии, N_M — число металлов, n — число вакансий, m — число водородов (здесь равна нулю).

Для титана энергия образования вакансии равна:

$$E_F(N_{Ti}, 1, 0) = E(N_{Ti} - 1, 1, 0) - \frac{N_{Ti} - 1}{N_{Ti}} E(N_{Ti}, 0, 0) \quad (3.1.2)$$

где N_{Ti} — число металлов.

Структуры титан-дефект-водород можно характеризовать энергией абсорбции и энергией связи.

Энергия абсорбции — это энергия, генерируемая в процессе адсорбции из-за медленного движения молекул в процессе адсорбции, в конечном итоге останавливается на поверхности адсорбционной среды, часть энергии будет высвобождаться из-за уменьшения скорости. Эта часть энергии называется энергией адсорбции. Она определяется по формуле:

$$E_{ads}(N_{Ti}, 1, N_H) = E(N_{Ti} - 1, 1, N_H) - \left[\frac{N_{Ti} - 1}{N_{Ti}} E(N_{Ti}, 0, 0) + N_H \times \frac{1}{2} E(H_2) \right] \quad (3.1.3)$$

где E_{ads} — энергия адсорбции.

Энергия связи — Это энергия, высвобождаемая при объединении двух или более частиц в более крупные частицы или энергия, которую соответствующие частицы должны поглощать, чтобы проникнуть в исходные частицы. Эти два выражения эквивалентны. Она определяется по формуле:

$$\Delta E = \sum_{i=1}^N E_i - E \quad (3.1.4)$$

где ΔE — энергия связи компонентов в системе из N компонентов (частиц), E_i — полная энергия i -го компонента в несвязанном состоянии (бесконечно удалённой покоящейся частицы) и E — полная энергия связанной системы.

Были определены энергии абсорбции и энергии связи для структур вакансия – водород и краевая дислокация – водород. А также энергия абсорбции водорода в идеальном кристалле. Значения представлены в таблицах 1 и 2.

Табл. 1 – Энергия адсорбции дислокации

Структура	$E_{адс}$, эВ
Дислокация + Н (далеко от дислокации)	-13577,635
Дислокация + Н (не далеко от дислокации)	-13577,655
Дислокация	-13573,929

С помощью результаты, которые показаны в таблице 1 и формулы (3.1.4) можно определить:

$$E_{ads}^H \Delta = -1.48 \text{ эВ}$$

Табл. 2 - Энергия адсорбции

Элемент	Идеальные решетки	Вакансия	Краевая дислокация
Pd	-0,1 эВ	-0,36 эВ	-0,31 эВ
Ti	-1,5 эВ	-1,9 эВ	-1,5 эВ
Ni	-0,16 эВ	-0,25 эВ	-0,1 эВ

Табл. 3 - Энергия связи

Дефект	Pd	Ni	Ti
Вакансия	0,262 эВ	0,4 эВ	1,3 эВ
Дислокация	0,17-0,21 эВ	0,09-0,15 эВ	

Структуры дислокации в титане без водорода (рис. 12) и с водородом (рис. 13 и рис. 14) показаны вниз:

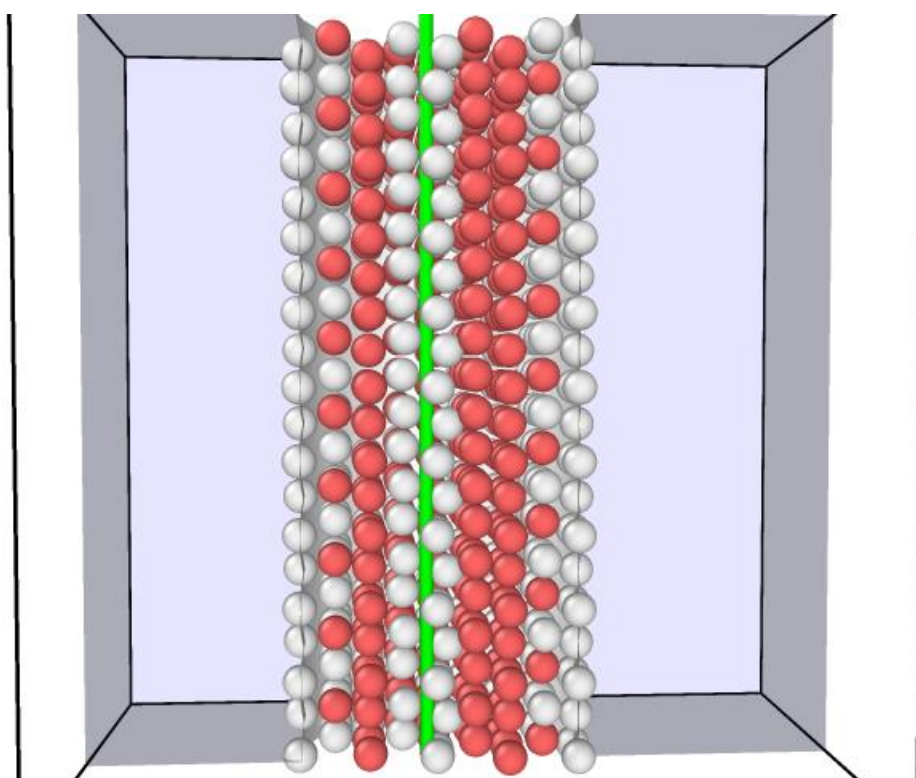


Рис. 12. Структура титана с краевой дислокацией (без водорода)

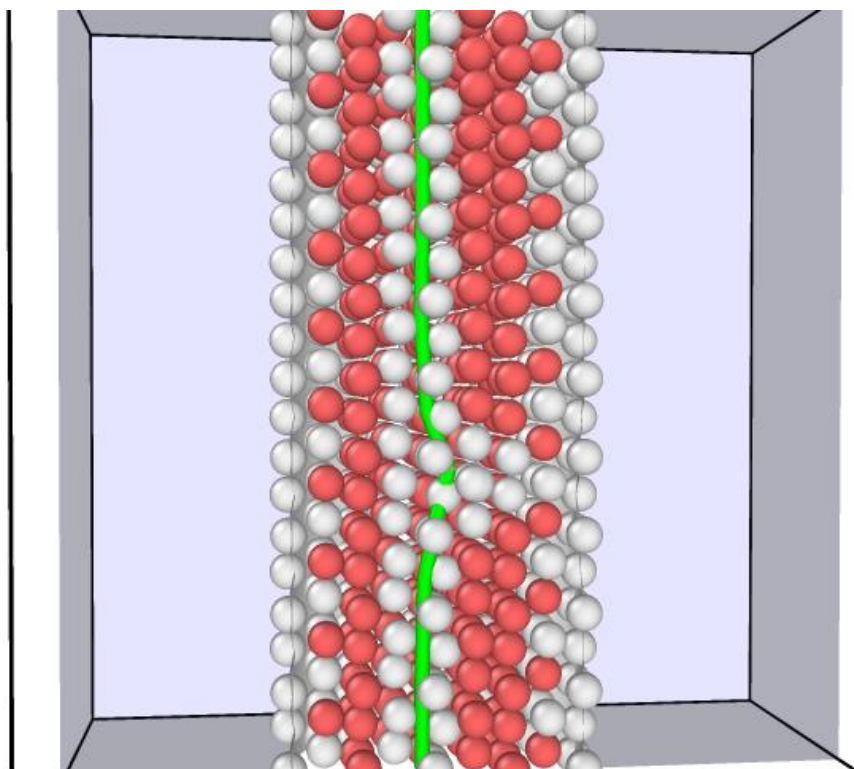


Рис. 13 Структура титана с краевой дислокацией (водород не далеко от дислокации)

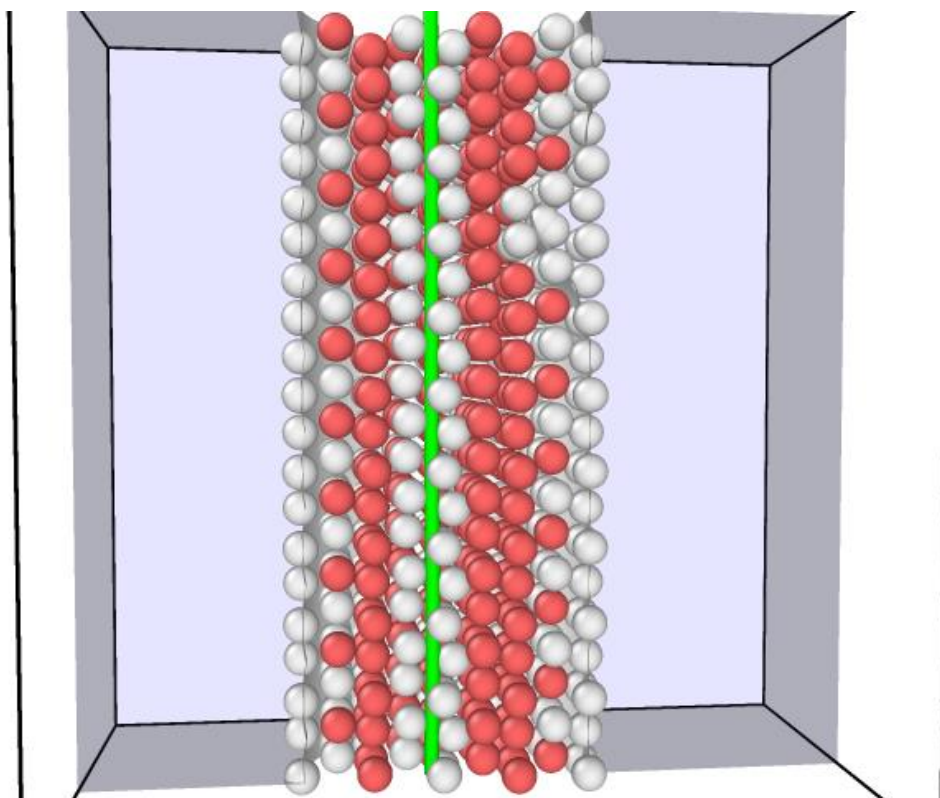


Рис. 14 Структура титана с краевой дислокацией (водород далеко от дислокации)

Для исследования свойства системы титан-водород, также были исследованы структуры с несколькими атомами водорода в области вакансии. Результаты представлены на рисунке 17.

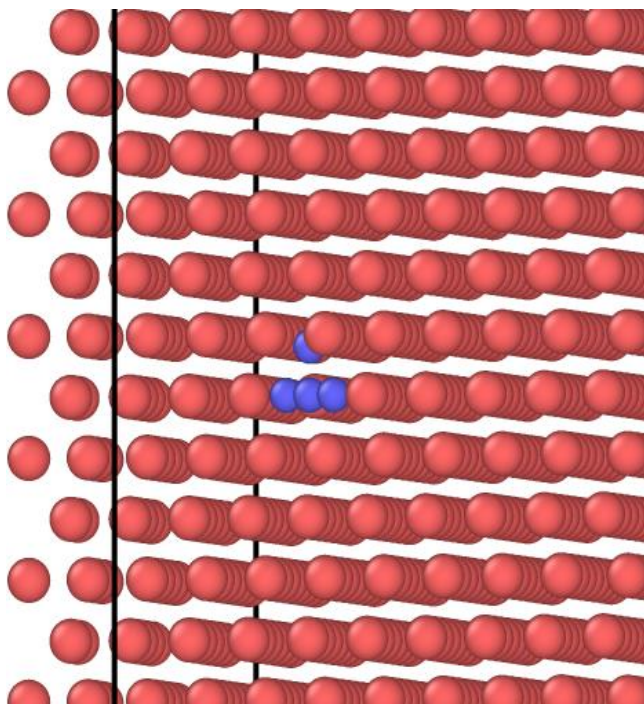


Рис. 15 Структура титана с 4 атомами водорода в вакансии

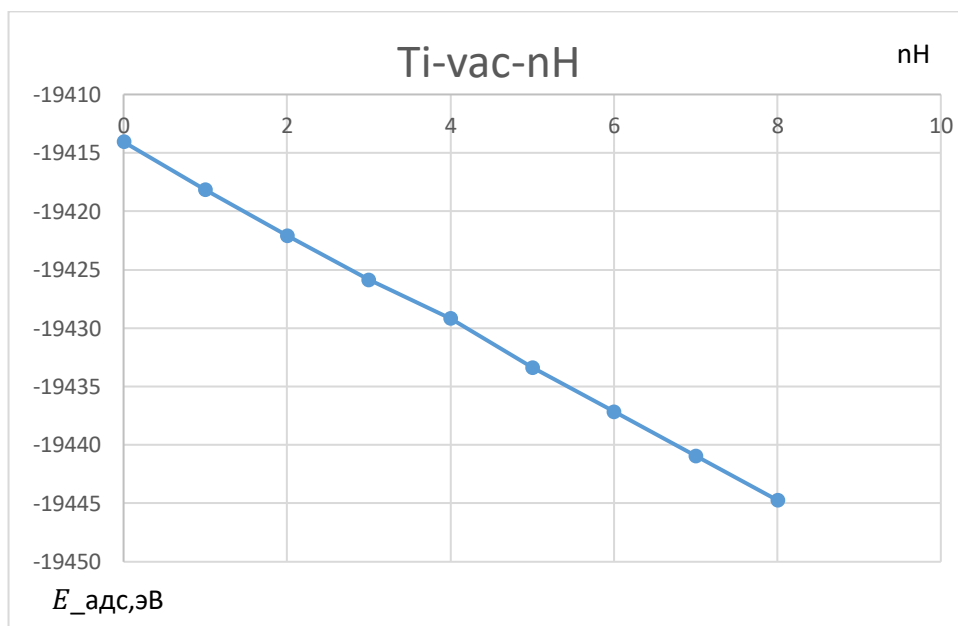


Рис. 16 Зависимость энергии адсорбции водорода в вакансии от количества водорода

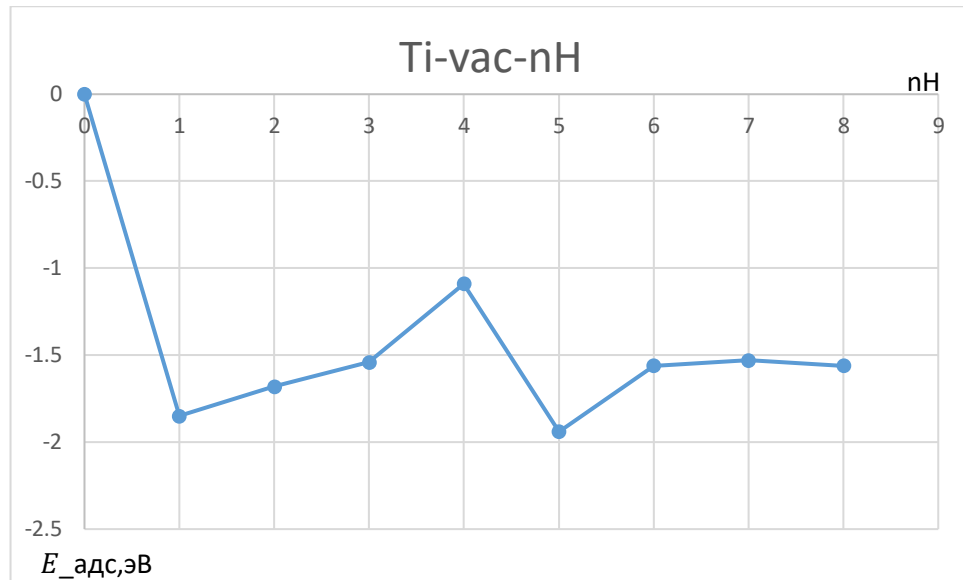


Рис. 17 Зависимость полной энергии системы Ti –vac - nH
от количества водорода

$$E_{ads}^H = E_{Ti(N)+H(M+1)} - E_{Ti(N)+H(M)} - \frac{1}{2}E_{H_2} \quad (3.1.5)$$

где $E_{Ti(N)+H(M+1)}$ - энергии систем с N атомами Ti и либо M атомами H (при этом дополнительный атом водорода добавляется в ту или иную позицию в решетке).
 $\frac{1}{2}E_{H_2}$ - энергия, приходящаяся на один атом H в молекуле водорода. [12]

3.2 Определение параметров диффузии для водорода в структурах с дефектами.

Исследование диффузии водорода в металлах является важным аспектом определения поведения водорода в металлах.

Для расчета параметра диффузии используем формулу:

$$D = \frac{R^2}{6t} \quad (3.2.1)$$

где D – параметр диффузии, R^2 – квадрат смещения атомов, t – время диффузии.

В структуре титана с одной вакансией, помещали водород и рассчитали коэффициент диффузии для температуры 1000 K:

$$D = 1,7967 \times 10^{-8} \text{ м}^2/\text{с}$$

Заключение.

В настоящей работе исследованы энергетические характеристики систем титан – дефект –водород методом молекулярной динамики, с помощью потенциала межатомного взаимодействия, разработанного в работе [13]. Определено, что энергия абсорбции водорода в области дефектов ниже, чем в идеальной решетке, поэтому дефекты могут служить ловушками для водорода.

Вакансия является более эффективной ловушкой, чем дислокация, так как энергия адсорбции в ней меньше. Кроме того, было определено, что энергия адсорбции остается отрицательной и при увеличении числа атомов водорода в области вакансии. Это означает, что вакансия может сорбировать большее число атомов водорода.

Кроме того, определен коэффициент диффузии водорода в образце, содержащем вакансию. Его значение практически не отличается от значения коэффициента диффузии в образце с идеальной структурой.

4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

Введение

В настоящее время перспективность научного исследования определяется не столько масштабом открытия, оценить которое на первых этапах жизненного цикла высокотехнологического и ресурсоэффективного продукта бывает достаточно трудно, сколько коммерческой ценностью разработки. Оценка коммерческой ценности разработки является необходимым условием при поиске источников финансирования для проведения научного исследования и коммерциализации его результатов. Это важно для разработчиков, которые должны представлять состояние и перспективы проводимых научных исследований.

Необходимо понимать, что коммерческая привлекательность научного исследования определяется не только превышением технических параметров над предыдущими разработками, но и тем, насколько быстро разработчик сумеет найти ответы на такие вопросы – будет ли продукт востребован рынком, какова будет его цена, каков бюджет научного проекта, какой срок потребуются для выхода на рынок и т.д.

Таким образом, целью раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» является проектирование и создание конкурентоспособных разработок, технологий, отвечающих современным требованиям в области ресурсоэффективности и ресурсосбережения.

4.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Это исследование представляет интерес для металлургии. Для введения результатов выпускной квалификационной работы на тему «Атомная и электронная структуры системы никель-водород: расчеты из первых принципов» на целевой рынок, необходимо, прежде всего, произвести анализ потребителей результатов исследования и выявить сегмент рынка.

4.1.1 Технология QuaD

Таблица 4 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы	Максимальный балл	Относительное значение (3/4)	Средневзвешенное значение (3x2)
1	2	3	4	5	
Показатели оценки качества разработки					
1. Доступность (понятность)	0,3	95	100	0,95	28,5
2. Удобство использования	0,3	90	100	0,9	27
3. Простота	0,08	80	100	0,8	6,4
4. Унифицированность	0,02	75	100	0,75	1,5
5. Полнота изложения	0,1	95	100	0,95	9,5
Показатели оценки коммерческого потенциала разработки					
6. Конкурентоспособность продукта	0,06	75	100	0,75	4,5
7. Перспективность рынка	0,06	85	100	0,85	5,1
8. Цена	0,08	95	100	0,95	7,6
Итого	1				90,1

Проведем оценку качества и перспективности по технологии QuaD по формуле:

$$P_{cp} = \sum B_i \cdot B_i = 90,1 \quad (4.1.1)$$

где P_{cp} – средневзвешенное значение показателя качества и перспективности научной разработки;

B_i – вес показателя (в долях единицы);

B_i – средневзвешенное значение i -го показателя.

Если значение показателя P_{cp} получилось 90,1, то такая разработка считается перспективной.

4.2 SWOT-анализ

Для исследования внешней и внутренней среды проекта применяют анализ SWOT – комплексный анализ научно-исследовательского проекта. Специфика данного анализа формируется несколькими этапами.

На первом этапе выявляются сильные и слабые стороны реализованного проекта в выпускной работе, которые оказывают свое действие во внешней среде. Далее выявляют возможности, включающие в себя любую предпочтительную ситуацию, возникающую в условиях окружающей среды проекта. Последним этапом является выявление угроз проекта, представляющих собой любую нежелательную ситуацию, тенденцию или изменение в условиях окружающей среды проекта. К конечному счету, производится анализ интерактивной таблицы в форме записи сильно коррелирующих сильных сторон и возможностей, или слабых сторон и возможностей.

В рамках данного этапа необходимо построить интерактивную матрицу проекта. Ее использование помогает разобраться с различными комбинациями взаимосвязей областей матрицы SWOT. Возможно использование этой матрицы в качестве одной из основ для оценки вариантов стратегического выбора. Каждый фактор помечается либо знаком «+» (означает сильное соответствие сильных сторон возможностям), либо знаком «-» (что означает слабое соответствие); «0» – если есть сомнения в том, что поставить «+» или «-». Пример интерактивной матрицы проекта представлен в таблице 5.

Таблица 5 – Интерактивная матрица проекта

Сильные стороны проекта						
Возможност и проекта		C1	C2	C3	C4	C5
	B1	+	+	-	0	+
	B2	-	+	+	-	0
	B3	-	+	+	-	0
	B4	+	-	0	+	0

Анализ интерактивных таблиц представляется в форме записи сильно коррелирующих сильных сторон и возможностей, или слабых сторон и возможностей и т.д. следующего вида: B1C1C2C5; B4C1C4. Каждая из записей представляет собой направление реализации проекта.

В случае, когда две возможности сильно коррелируют с одними и теми же сильными сторонами, с большой вероятностью можно говорить об их единой природе. В этом случае, возможности описываются следующим образом: B2B3C2C3.

Итогом данного анализа является матрица SWOT, в которой приведены все составляющие данного проекта.

Таблица 6 – SWOT-анализ

	Сильные стороны научно исследовательского проекта:	Слабые стороны научно исследовательского проекта:
	<p>C1. Заявленная экономичность и энергоэффективность метода.</p> <p>C2. Быстрый анализ полученных данных.</p>	<p>Сл1. Проведение исследований исключительно при комнатной температуре.</p>

	<p>С3. Более низкая стоимость производства по сравнению с другими технологиями.</p> <p>С4. Легкий интерфейс управления.</p> <p>С5. Безопасность проведения исследований.</p>	<p>Сл2. Предварительная подготовка экспериментальных образцов перед исследованием.</p> <p>Сл3. Низкий уровень проникновения на рынок.</p> <p>Сл4. Отсутствие необходимого оборудования для выполнения расчетов.</p> <p>Сл5. Длительный срок расчетов.</p>
<p>Возможности:</p> <p>В1. Решение фундаментальных задач исследования.</p> <p>В2. Появление дополнительного спроса на новый продукт.</p> <p>В3. Исследования коррозионных свойств металлов.</p> <p>В4. Повышение стоимости конкурентных разработок.</p>	<p>Заявленная повышенная экономичность, энергоэффективность и безопасность проекта способствует появлению дополнительного спроса на данный продукт. Также быстрый анализ полученных экспериментальных данных повлечет дополнительное решение фундаментальных задач исследования.</p>	<p>Проведение исследований исключительно при комнатных температурах способствует повышению стоимости конкурентных разработок.</p>
<p>Угрозы:</p> <p>У1. Несвоевременное финансирование научного исследования</p>	<p>Более низкая стоимость производства по сравнению с другими технологиями повлечет изменение спецификаций и</p>	<p>Отсутствие необходимого оборудования для проведения испытания опытного образца будет являться неотъемлемым</p>

<p>при дальнейшем развитии проекта.</p> <p>У2. Развитая конкуренция технологий производства.</p> <p>У3. Ограничения на экспорт технологии.</p> <p>У4. Введение дополнительных государственных требований к сертификации продукции.</p>	<p>стандартов на поставку экспериментальных металлических образцов запрещенного типа.</p>	<p>фактором, представляющим собой барьер для экспорта технологии. Также низкий уровень проникновения на рынок способствует несвоевременному финансированию научного исследования при дальнейшем развитии проекта.</p>
--	---	---

Из таблицы, Поле СИВ показывает, необходимо использовать заявленная экономичность и энергоэффективность технологии, чтобы получить отдачу от возможностей во внешней среде. Поле СЛВ показывает, за счет проведения исследований исключительно при комнатных температурах, внешней среды организация сможет преодолеть имеющиеся слабости. Поле СИУ показывает, необходимо использовать более низкую стоимости производства по сравнению с другими технологиями организации для устранения угроз. Поле СЛУ показывает, необходимо избавиться от отсутствия оборудования для проведения испытания опытного образца, чтобы попытаться предотвратить нависшую угрозу.

4.3 Структура работ в рамках научного исследования.

4.3.1 Планирование этапов работ

Для выполнения и планирования данной работы по теме *атомной и электронной структур системы никель-водород: расчеты из первых принципов*, сначала нужно ее разделить на несколько частей, то есть различные этапы:

1. Подготовительный этап. Выбор темы; анализ актуальности темы, анализ информации по выбранной теме. Техничко-экономическое обоснование целесообразности проведения исследований по данной теме;

2. Изучение литературы по теме, формирование теоретической части. Выявление возможных направлений исследования, календарное планирование работ;

3. Проведение расчетов по теоретической части;

4. Количественная оценка расчетного исследования, выбор параметров, проведение численного моделирования;

5. Анализ результатов, выводы и предложения по теме, обобщение результатов разработки. Составление технологического отчета;

6. Завершающий этап. Утверждение результатов работы, заключение, подготовка отчетной документации.

Научные исследования выполнили научный руководитель и студент.

Таблица 7 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Должность исполнителя
Создание темы проекта	1	Составление и утверждение темы НИР	Научный руководитель
	2	Анализ актуальности темы	

Выбор направления исследования	3	Поиск и изучение материала по теме	Студент
	4	Выбор направления исследований	Научный руководитель, студент
	5	Календарное планирование работ	
Теоретические исследования	6	Изучение литературы по теме	Студент
	7	Подбор нормативных документов	
	8	Анализ используемых средств и методов	
	9	Систематизация и оформление информации	
Оценка полученных результатов	10	Анализ результатов	Научный руководитель, студент
	11	Заключение	Научный руководитель, студент
Оформление отчета по НИР	12	Составление пояснительной записки	Студент
Защита отчета	13	Защита ВКР	Студент

4.3.2 Определение трудоемкости выполнения НИОКР

Трудоемкость выполнения НИОКР оценивается экспертным путем в человеко-днях и носит вероятностный характер, т.к. зависит от множества трудно учитываемых факторов. Расчет трудоемкости осуществляется опытно-статистическим методом, основанным на определении ожидаемого времени выполнения работ в человеко-днях по формуле:

$$t_{о\ x\ i} = \frac{3 \cdot t_{\min i} + 2 \cdot t_{\max i}}{5} \quad (4.3.1)$$

где $t_{о\ ж\ i}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения i -ой работы, чел.-дн.;

$t_{\min i}$ – минимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы (оптимистическая оценка: в предположении наиболее благоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.;

$t_{\max i}$ – максимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы (пессимистическая оценка: в предположении наиболее неблагоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.

Рассчитаем значение ожидаемой трудоёмкости работы:

Для установления продолжительности работы в рабочих днях используем формулу:

$$T_{pi} = t_{oxi} / Ч_i \quad (4.3.2)$$

где T_{pi} – продолжительность одной работы, раб. дн.;

$t_{ож\ i}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, чел.-дн.;

$Ч_i$ – численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, чел.

Для удобства построения календарного план-графика, длительность этапов в рабочих днях переводится в календарные дни и рассчитывается по следующей формуле:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k \quad (4.3.3)$$

где T_{ki} – продолжительность выполнения одной работы, календ. дн.;

T_{pi} – продолжительность одной работы, раб. дн.;

k – коэффициент календарности, предназначен для перевода рабочего времени в календарное.

Коэффициент календарности рассчитывается по формуле:

$$k = T_{кг} / (T_{кг} - T_{вд} - T_{пд}) \quad (4.3.4)$$

где $T_{кг}$ – количество календарных дней в году;

$T_{вд}$ – количество выходных дней в году;

$T_{пд}$ – количество праздничных дней в году.

Определим длительность этапов в рабочих днях и коэффициент календарности:

$$k = \frac{T_{кг}}{T_{кг} - T_{вд} - T_{пд}} = \frac{365}{365 - 52 - 14} = 1,22 \quad (4.3.5)$$

тогда длительность этапов в рабочих днях, следует учесть, что расчетную величину продолжительности работ T_k нужно округлить до целых чисел.

4.4 Определение трудоемкости выполнения работ

Трудовые затраты в большинстве случаях образуют основную часть стоимости разработки, поэтому важным моментом является определение трудоемкости работ каждого из участников научного исследования.

Трудоемкость выполнения научного исследования оценивается экспертным путем в человеко-днях и носит вероятностный характер, т.к. зависит от множества трудно учитываемых факторов. Для определения ожидаемого (среднего) значения трудоемкости $t_{ожи}$ используется следующая формула:

$$t_{ожи} = \frac{3t_{\min i} + 2t_{\max i}}{5} \quad (4.4.1)$$

где $t_{ожі}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения i -ой работы чел.-дн.;

$t_{\min i}$ – минимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы (оптимистическая оценка: в предположении наиболее благоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.;

$t_{\max i}$ – максимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы (пессимистическая оценка: в предположении наиболее неблагоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.

Для выполнения перечисленных в таблице 4 работ требуются специалисты:

- инженер (И);
- научный руководитель (НР).

Исходя из ожидаемой трудоемкости работ, определяется продолжительность каждой работы в рабочих днях T_p , учитывающая параллельность выполнения работ несколькими исполнителями. Такое вычисление необходимо для обоснованного расчета заработной платы, так как удельный вес зарплаты в общей сметной стоимости научных исследований составляет около 65 %.

$$T_{p_i} = \frac{t_{ожі}}{\mathcal{C}_i} \quad (4.5.1)$$

где T_{pi} – продолжительность одной работы, раб. дн.;

$t_{ожі}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, чел.-дн.

\mathcal{C}_i – численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, чел.

4.5 Разработка графика проведения научного исследования

Для удобства построения графика, длительность каждого из этапов работ из рабочих дней следует перевести в календарные дни. Для этого необходимо воспользоваться следующей формулой:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{\text{кал}} \quad (4.5.1)$$

где T_{ki} – продолжительность выполнения i -й работы в календарных днях;

T_{pi} – продолжительность выполнения i -й работы в рабочих днях;

$k_{\text{кал}}$ – коэффициент календарности.

Коэффициент календарности определяется по следующей формуле:

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}} \quad (4.5.2)$$

где $T_{\text{кал}}$ – календарные дни ($T_{\text{кал}} = 365$);

$T_{\text{вых}}$ – выходные дни ($T_{\text{вых}} = 52$);

$T_{\text{пр}}$ – праздничные дни ($T_{\text{пр}} = 14$).

В таблице 8 приведены длительность этапов работ и число исполнителей, занятых на каждом этапе.

Таблица 8 – Длительность этапов работ и число исполнителей, занятых на каждом этапе

Этап	Исполнители	Продолжительность работ, дни						Длительность работ, чел/дн.			
		t_{\min}		t_{\max}		$t_{\text{ож}}$		T_{pi}		T_k	
		НР	И	НР	И	НР	И	НР	И	НР	И
Постановка задачи	НР	3	10	5	13	3,8	11,2	4,56	–	5,53	–
Разработка и утверждение технического задания (ТЗ)	НР, И	2	12	4	15	2,8	13,2	0,34	3,36	0,41	4,07
Подбор и изучение материалов по тематике	НР, И	10	15	13	20	11,2	17	4,03	13,44	4,88	16,28

Разработка календарного плана	НР, И	2	3	4	5	2,8	3,8	0,6 7	3,3 6	0,81	4,07
Обсуждение литературы	НР, И	2	6	4	9	2,8	7,2	1,0 1	3,3 6	1,22	4,07
Проектирование структуры ПО	НР, И	15	10	20	13	17	11,2	20, 4	14, 28	24,7 2	17,3
Разработка ПО	НР, И	12	15	15	20	13,2	17	7,9 2	15, 84	9,60	19,19
Тестирование ПО	И	6	2	10	4	7,6	2,8	-	9,1 2	-	11,05
Оформление расчетно- пояснительной записки	И	6	15	9	20	7,2	17	-	8,6 4	-	10,47
Оформление графического материала	И	2	3	5	5	3,2	3,8	-	3,8 4	-	4,65
Подведение итогов	НР, И	2	2	3	4	2,4	2,8	1,7 2	2,8 8	2,08	3,49
Итого:						74	78	40, 65	78, 12	49,2 7	94,68

На основе таблицы 8 строится календарный план-график. График строится для максимального по длительности исполнения работ в рамках научно-исследовательского проекта на основе таблицы 8 с разбивкой по месяцам и декадам (10 дней) за период времени дипломирования. При этом работы на графике следует выделить различной штриховкой в зависимости от исполнителей, ответственных за ту или иную работу.

4.6 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)

При планировании бюджета НТИ должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов расходов, связанных с его выполнением.

4.6.1 Расчет материальных затрат НТИ

Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

$$Z_m = (1 + k_T) \cdot \sum_{i=1}^m C_i \cdot N_{расхi}, \quad (4.6.1)$$

где: m – количество видов материальных ресурсов, потребляемых при выполнении научного исследования;

$N_{расхi}$ – количество материальных ресурсов i -го вида, планируемых к использованию при выполнении научного исследования (шт., кг, м, м² и т.д.);

C_i – цена приобретения единицы i -го вида потребляемых материальных ресурсов (руб./шт., руб./кг, руб./м, руб./м² и т.д.);

k_T – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы.

Транспортные расходы принимаются в пределах 15-25% от стоимости материалов.

Таблица 9 – Материальные затраты

Наименование	Единица измерения	количество		Цена за ед., руб.		Затраты на материалы, (З _м), руб.	
		Исп. 1	Исп. 2	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 1	Исп. 2
Бумага	лист	150	100	2	2	345	230
Картридж для принтера	шт.	1	1	1000	1000	1150	1150
Интернет	М/бит (пакет)	1	1	350	350	402,5	402,5
Ручка	шт.	1	1	20	20	23	23

Дополнительная литература	шт.	2	1	400	350	920	402,5
Тетрадь	шт.	1	1	10	10	11,5	11,5
Итого					2852	2219,5	2135,5

4.6.2 Основная и дополнительная заработная плата исполнителей темы

Основная заработная плата ($Z_{\text{осн}}$) руководителя (лаборанта, инженера) от предприятия (при наличии руководителя от предприятия) рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{\text{зп}} = Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_p \quad (4.6.2)$$

где: $Z_{\text{осн}}$ – основная заработная плата;

T_p – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн. (таблица 8);

$Z_{\text{дн}}$ – среднедневная заработная плата работника, руб.

Максимальная основная заработная плата руководителя (доктора наук) равна примерно 17000 рублей, а студента 9893 рублей.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле: для руководителя и бакалавра считается отдельно. (Бакалавр берет заработную плату как младший научный сотрудник 1-го уровня)

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_m \cdot M}{F_d} \quad (4.6.3)$$

где Z_m – месячный должностной оклад работника, руб.;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

при отпуске в 24 раб. дня $M=11,2$ месяца, 5-дневная неделя;

при отпуске в 48 раб. дней $M=10,4$ месяца, 6-дневная неделя;

F_d – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн. (таблица 10).

Таблица 10 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Студент
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней		
- выходные дни	52	52
- праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени		
- отпуск	48	48
Действительный годовой фонд рабочего времени (F_d)	251	251

В состав основной заработной платы включается премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы в размере 20 –30 % от тарифа или оклада. Расчет основной заработной платы сводится в таблице 11.

Таблица 11 – Расчет основной заработной платы

Исполнители	k_t	$Z_{тс},$ руб.	$k_{пр}$	k_d	k_p	$Z_m,$ руб	$Z_{дн},$ руб.	$T_p,$ раб. дн.	$Z_{осн},$ руб.
Руководитель	1	46000	0,3	0,2	1,3	89700	4002	41	164104
Студент	1	9893	0,3	0,2	1,3	19291	799	78	62347

Таким образом, заработная плата руководителя равна 58794 рублей, студента –55068 рублей.

4.6.3 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

$$Z_{\text{вн е б}} = k_{\text{вн е б}} \cdot Z_{\text{о с н}} \quad (4.6.4)$$

где: $k_{\text{внеб}}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.).

На 2015 г. в соответствии с Федеральным законом от 24.07.2009 №212-ФЗ установлен размер страховых взносов равный 30%. На основании пункта 1 ст.58 закона №212-ФЗ для учреждений, осуществляющих образовательную и научную деятельность в 2015 году водится пониженная ставка – 27,1%.

Таблица 12 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	Основная заработная плата, руб
Руководитель проекта	164104
Студент (Инженер)	62347
Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды	0,302
Итого	226451,271 руб

4.6.4 Накладные расходы

Накладные расходы учитывают прочие затраты организации, не попавшие в предыдущие статьи расходов: печать и ксерокопирование материалов исследования, оплата услуг связи, электроэнергии, почтовые и телеграфные расходы, размножение материалов и т.д.

Таким образом, наибольшие накладные расходы при первом исполнении равны: $Z_{\text{накл}} = 0.35 \text{ кВт/час} \cdot 5 \text{ час/дн.} \cdot 125 \text{ дн.} \cdot 0,16 \cdot 5,8 \text{ руб/кВт/час} = 203 \text{ руб.}$

4.6.5 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Таблица 13 – Расчет бюджета затрат НТИ

Наименование статьи	Сумма, руб.
Материальные затраты НТИ	2852
Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	36290
Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	32157,5
Отчисления во внебюджетные фонды	226451,271
Накладные расходы	203
Бюджет затрат НТИ	95693.0

Выводы

Для исследования понимание процессов, происходящих в системе никель–водород. Исследование электронной и атомной структуры систем металл–водород позволяют продвинуться в понимании особенностей взаимодействия водорода с никелем. В физике твердого тела существуют различные методы расчета электронной структуры металлов: метод сильной связи, метод псевдопотенциала, метод линеаризованных присоединенных плоских волн.

Бюджет затрат, приведенный в таблице 13 обусловлен необходимостью разработки экспериментальной методики для быстрого и качественного исследования из первых принципов особенностей взаимодействия водорода с металлом-растворителем.

Полученные в ходе исследования результаты, при затрате 95693.0 рублей на реализацию, могут быть использованы для дальнейших исследований систем металл-водород, а также в целях разработки защитных методик подготовки образцов для снижения вероятности водородного охрупчивания металлов и сплавов. Работа имеет большую практическую ценность и в полной мере способствует решению многих фундаментальных задач.

5. Социальная ответственность

Никель широко используют при изготовлении различной химической аппаратуры, в кораблестроении, в электротехнике, при изготовлении никеля-металлогибридных аккумуляторов, для многих других целей. Он тоже используется для хранения водорода. Водород является наиболее распространенным элементом во вселенной в настоящее время. Взаимодействие водорода с переходными металлами – это одно из основных научных направлений исследований материалов. Научный интерес, в частности, представляет взаимодействие водорода с никелем. Насыщение никеля водородом приводит к хрупкому межкристаллитному разрушению: при испытании на растяжение относительное удлинение чистого никеля при 20 °С не зависит от скорости деформации, тогда как удлинение наводороженного никеля уменьшается с ее понижением. Относительно высокая стойкость электролитического никеля обусловлена его высокой пассивностью, в то время как никель металлургический более активен. Это различие связывается с содержанием в никеле водорода. Расчеты из первых принципов позволяют выявить особенности взаимодействия водорода с никелем на микроскопическом уровне. Термин “из первых принципов” (*ab initio* в зарубежной литературе) означает, что никакие экспериментальные параметры не используются при проведении расчётов, нет никаких подгоночных значений и изначальные входные параметры опираются только на общеизвестные фундаментальные физические постоянные.

5.1 Техногенная безопасность

Работа компьютера осуществляется за счет питания от сети переменного тока напряжением 220 В. При выполнении работ на компьютере возможно воздействие следующих вредных факторов:

- Микроклимат;
- Электромагнитные поля
- Статическое электричество
- Шум
- Недостаточное освещение

Также возможно воздействие таких опасных производственных факторов как:

- Электрическое напряжение;
- Воздействие высокой температуры;

5.1.1 Микроклимат

Основными факторами, характеризующими микроклимат производственной среды, являются: температура, подвижность и влажность воздуха. Отклонение этих параметров от нормы приводит к ухудшению самочувствия работника, снижению производительности его труда и к возникновению различных заболеваний.

Так работа в условиях высокой температуры сопровождается интенсивным потоотделением, что приводит к обезвоживанию организма, потере минеральных солей и водорастворимых витаминов, вызывая серьезные и стойкие изменения в деятельности сердечно-сосудистой системы, увеличивая частоту дыхания, а также оказывая влияние на функционирование других

органов и систем (ослабление внимания, ухудшение координации движений, замедление реакции тела и т.д.).

Высокая относительная влажность при высокой температуре воздуха способствует перегреванию организма, при низкой же температуре увеличивает теплоотдачу с поверхности кожи, что ведет к переохлаждению организма. Низкая влажность вызывает неприятные ощущения в виде сухости слизистых оболочек дыхательных путей работающего.

При нормировании метеорологических условий в производственных помещениях учитывают время года, физическую тяжесть выполняемых работ, а также количество избыточного тепла в помещении. Оптимальные и допустимые метеорологические условия температуры и влажности устанавливаются согласно СанПин 2.2.4.548-96 (Таблица 14).

Для удобства работы в помещении необходимо нормирование параметров микроклимата, то есть необходимо проведение мероприятий по контролю способов и средств защиты от высоких и низких температур, системы отопления, вентиляции и кондиционирования воздуха, искусственное освещение и т.п.

Таблица 14 – Оптимальные показатели микроклимата на рабочих местах производственных помещений (СанПиН 2.2.4.548-96)

Период года	Категория работ по уровню энергозатрат, Вт	Температура воздуха, °С	Температура поверхностей, °С	Относительная влажность воздуха, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный	Ia (до 139)	22-24	21-25	60-40	0,1
Теплый	Ia (до 139)	23-25	22-26	60-40	0,1

5.1.2 Электромагнитные поля

Дипломная работа выполнялась с применением персональных компьютеров (ПЭВМ) типа IBM PC. Основным вредным фактором, воздействию которого подвергается инженер-исследователь при работе за компьютером, является электромагнитное излучение.

Безопасные уровни излучений регламентируются нормами СанПиН 2.2.2/2.4.1340–03 и представлены в таблице 15.

Таблица 15 – Временные допустимые уровни (ВДУ) электромагнитных полей, создаваемых ПЭВМ на рабочих местах

Наименование параметров	Нормы в диапазоне частот	ВДУ
Напряженность электрического поля	5 Гц - 2 кГц	25 В/м
	2 кГц - 400 кГц	2,5 В/м
Плотность магнитного потока	5 Гц - 2 кГц	250 нТл
	2 кГц - 400 кГц	25 нТл
Напряженность электростатического поля		15 кВ/м

Вредное воздействие ПЭВМ на организм человека проявляется в нагрузке на зрение, заболеваниях кожи лица, нервных и психических заболеваниях и т.д.. Допустимая напряжённость электрического поля: 25 В/м (5Гц-2кГц) и 2,5 В/м (2-400 кГц). Для защиты от электромагнитных полей используются различные фильтры. Ориентация светопроемов должна быть северо-восточной или северной. Источники искусственного освещения: люминесцентные лампы типа

ЛБ и ДРЛ. Оптимальные параметры микроклимата. При работе с ПЭВМ уровень звука не должен превышать значений, установленных для данных видов работ. Кроме этого, для ослабления влияния рассеянного рентгеновского излучения от монитора ПК рекомендуется использовать защитные фильтры (экраны).

5.1.3 Шум

Сильный шум вызывает трудности в распознавании цветовых сигналов, снижает быстроту восприятия цвета, остроту зрения, зрительную адаптацию, нарушает восприятие визуальной информации, снижает способность быстро и точно выполнять координированные движения, уменьшает на 5–12 % производительность труда. Длительное воздействие шума с уровнем звукового давления 90 дБ снижает производительность труда на 30–60 %.

В рассматриваемом кабинете основными источниками шума являются кондиционер, три компьютера (охлаждение внутри системного блока, оптические приводы DVD-ROM).

При выполнении основной работы на ПЭВМ в помещениях, где работают программисты, уровень шума не должен превышать 50 дБА.

В соответствии со спецификацией на компьютер DNS Office XL, уровень шума блока питания компьютера составляет 5–10 дБА, уровень шума охлаждающего устройства процессора 15–20 дБА, остальные элементы охлаждения являются пассивными и их уровень шума не учитывается. Шум, вызываемый работой оптических приводов, также не учитывается, так как они используются в работе незначительно малое время.

В соответствии со спецификацией на кондиционер LG S09AWU, максимальный уровень шума, производимого внутренним его блоком, составляет 28 дБА.

Для доведения уровня шума до санитарных норм следует придерживаться следующих правил при организации труда в помещении:

- внутренний блок кондиционера следует располагать вдали от людей, занимающихся творческой деятельностью (программисты), и не использовать на полную мощность, если позволяют климатические условия;
- своевременно осуществлять профилактику системных блоков компьютеров (очистка от пыли и смазывание движущихся частей охлаждающих установок, замена излишне шумных комплектующих).

5.1.4 Недостаточное освещение

Рациональное освещение рабочего места позволяет предупредить травматизм и многие профессиональные заболевания. Правильно организованное освещение создает благоприятные условия труда, повышает работоспособность и увеличивает производительность труда. Освещение на рабочем месте должно быть таким, чтобы человек мог без напряжения выполнять свою работу. Существуют три вида освещения: естественное, искусственное, совмещенное.

К системам производственного освещения предъявляются следующие требования:

- соответствие уровня освещенности характеру выполняемой работы;
- достаточно равномерное распределение яркости на рабочих поверхностях и в окружающем пространстве;
- оптимальная направленность излучаемого осветительными приборами светового потока;

— долговечность, экономичность, электро- и пожаробезопасность, эстетичность, удобство и простота эксплуатации.

В соответствии с СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03, искусственное освещение в помещениях осуществляется системой общего равномерного освещения.

В производственных и административно-общественных помещениях, в случаях преимущественной работы с документами, разрешено применение системы комбинированного освещения (к общему освещению дополнительно устанавливаются светильники местного освещения, предназначенные для освещения зоны расположения документов).

Зрительная работа программиста характеризуется как работа очень высокой степени точности. Что требует освещенности в 300—500 лк. Допускается установка светильников местного освещения для подсветки документов, но с таким условием, чтобы оно не создавало бликов на поверхности экрана и не увеличивало освещенность экрана более чем на 300 лк. Светильники местного освещения должны иметь не просвечивающий отражатель с защитным углом не менее 40 градусов.

В качестве источников света при искусственном освещении должны применяться преимущественно люминесцентные лампы типа ЛБ. Освещение следует выполнять в виде сплошных или прерывистых линий светильников, расположенных сбоку от рабочих мест, параллельно линии зрения пользователя при рядном расположении персональных электронно-вычислительных машин (ПЭВМ). При расположении компьютеров по периметру помещения линии светильников должны располагаться локализовано над рабочим столом, ближе к его переднему краю, обращенному к оператору.

Согласно СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03, естественное освещение осуществляется посредством проемов, ориентированных преимущественно на север и северо-восток и обеспечивающих коэффициент естественной освещенности (КЕО) не менее 1,5 %.

Для обеспечения нормируемых значений освещенности в помещениях использования ЭВМ следует проводить чистку светильников не реже двух раз в год и проводить своевременную замену перегоревших ламп на аналогичные.

5.1.5 Электрическое напряжение

Воздействие электрического напряжения на человека связано с протеканием через него тока. Прохождение тока может вызывать у человека раздражение и повреждение различных органов. Пороговый неотпускающий ток составляет 50 Гц (6-16 мА). Защита от воздействия электрического тока осуществляется путем проведения организационных, инженерно-технических и лечебной-профилактических мероприятий.

При поражении работника электрическим током необходимо как можно скорее освободить пострадавшего от воздействия электрического тока, проверить состояние пострадавшего и вызвать при необходимости скорую помощь. До приезда скорой помощи оказать пострадавшему необходимую первую помощь или, при необходимости, организовать доставку пострадавшего в ближайшее лечебное учреждение, а о произошедшем несчастном случае поставить в известность руководителя структурного подразделения.

5.1.6 Воздействие высокой температуры

Запрещается открывать крышку нагретой печи, дотрагиваться до камеры, а также необходимо одевать спецодежду, во избежание получения термических ожогов при работе с экспериментальными установками с высокими рабочими температурами.

5.2 Региональная безопасность

Лабораторная работа всегда связана с постоянным образованием различных отходов: отходы инструмента, технологической оснастки, абразивных материалов, отходы бумаги и т.д.

При работе с суперкомпьютером возможно образование отходов: бумага. Бумагу используют для записи результатов экспериментов. Эти отходы могут вызвать загрязнение литосферы. Для охраны поверхностных и подземных вод от загрязнения и истощения, можно использовать бумагу повторно.

5.3 Организационные мероприятия обеспечения безопасности

Также обосновываются организационные мероприятия, обеспечивающие безопасную эксплуатацию компьютера: присутствие людей в рабочей зоне разрешается в течение 8 часов. Для обеспечения безопасности перед началом работы необходимо правильно надеть спецодежду, подготовить для работы необходимый инструмент и приспособления, приготовить рабочий стол. Также необходимо проверить отсутствие внешних повреждений электрооборудования, наличие и исправность контрольных, измерительных и сигнальных приборов, компьютера, тумблеров, переключателей и т.п. При выявлении неисправностей, не допускается проводить ремонт самостоятельно, необходимо доложить руководителю лаборатории. Наладка прибора и его ремонт осуществляется только сервис-инженерами.

Запрещается приступать к работе, если выявлены неисправности любого используемого оборудования, если персонал не прошел в установленном порядке обучение и проверку знаний безопасности труда.

Работа с суперкомпьютером должна производиться в чистом помещении, свободном от пыли, паров, кислот и щелочей, агрессивных газов и других вредных примесей, вызывающих коррозию. Недопустимо наличие открытого огня около прибора.

5.4 Особенности законодательного регулирования проектных решений

К работе на суперкомпьютере допускаются лица не моложе 18 лет, не имеющие медицинские противопоказания, прошедшие обучение безопасности труда и инструктаж на рабочем месте.

К самостоятельной работе допускаются работники после специального обучения и проверки знаний норм и правил работы с электроустановками, правил безопасности работы с газовыми баллонами, приобретенных навыков и безопасных способов выполнения работы на суперкомпьютере, имеющие не менее II группы по электробезопасности и получившие допуск к работе с газовыми баллонами.

Повторная проверка знаний норм и правил электробезопасности, правил безопасной работы с газовыми баллонами проводится с работниками не реже 1 раза в 12 месяцев, повторный инструктаж на рабочем месте – не реже 1 раза в 3 месяца

Проведение всех видов инструктажа должно оформляться в Журнале регистрации инструктажа установленного образца, с обязательными подписями получившего и проводившего инструктаж, с указанием даты проведения

инструктажа, наименования и номеров инструкции на виды работ, по которым проводится инструктаж.

По данной теме рассматриваются законодательный и нормативные документы:

- инструкция № 2-25 по охране труда при выполнении работ на установке Gas Reaction Controller;
- инструкция № 2-14 по охране труда при работе с электрооборудованием напряжением до 1000 В;
- инструкция № 2-07 по охране труда при работе с баллонами, работающими под давлением.

Документы по воздействию ПЭВМ:

- инструкция № 2-08 по охране труда при работе с ПЭВМ и ВДТ;
- СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организация работы;
- ГОСТ Р 50948-01. Средства отображения информации индивидуального пользования. Общие эргономические требования и требования безопасности;
- ГОСТ Р 50949-01. Средства отображения информации индивидуального пользования. Методы измерений и оценки эргономических параметров и параметров безопасности;
- ГОСТ Р 50923-96. Рабочее место оператора. Общие эргономические требования и требования к производственной среде. Методы измерения.

Микроклимат:

- ГОСТ 30494-96 Здания жилые и общественные помещения. Параметры микроклимата в помещении;

- ГОСТ 12.1.005 Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны;
- СанПиН 2.2.4.548-96 Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.

5.5 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

При обнаружении неисправной работы суперкомпьютера необходимо прекратить работу, выйти из программы, отключить питание компьютера, отключить насос, суперкомпьютеру от электросети и известить об этом руководителя.

При возникновении возгорания необходимо немедленно прекратить работу, отключить электрооборудование, позвонить в подразделение пожарной охраны по телефону 01 или 010, сообщить о случившемся руководителю подразделения и приступить к тушению огня первичными средствами пожаротушения.

Чтобы избежать опасности пожара и взрыва, можно принять следующие мероприятия:

- 1) планирование защиты населения и территорий от пожара и взрыва на уровне предприятия;
- 2) эвакуация работающих;
- 3) создание запасов средств индивидуальной защиты и поддержание их в готовности;
- 4) проектирование, размещение, строительство и эксплуатация объектов инфраструктуры, в том числе и потенциально опасных;

5) инженерное обеспечение защиты населения – строительство защитных сооружений (средств коллективной защиты).

В лаборатории обязательно показан план эвакуации: Заранее разработанный план (схема), в котором указаны пути эвакуации, эвакуационные и аварийные выходы, установлены правила поведения людей, порядок и последовательность действий в условиях чрезвычайной ситуации.



Рисунок 25 – План эвакуации при пожаре и других ЧС

5.6 Расчет искусственного освещения

Для промышленных предприятий оптимальная освещенность территории и помещений является важной и непростой технической задачей, решение которой обеспечивает нормальные гигиенические условия для работающего персонала. Правильно подобранные источники света и их проектирование

создают условия для производственного труда, корректности выполнения технологических операций, соблюдение правил и техники безопасности.

Главной задачей светотехнических расчётов для искусственного освещения является определение требуемой мощности электрической осветительной установки для создания заданной освещённости.

Внутри помещений по способу размещения светильников и распределению освещённости различают следующие системы искусственного освещения: общее и комбинированное.

Общим называется освещение, светильники которого освещают всю площадь помещения, как занятую оборудованием или рабочими местами, так и вспомогательную. В зависимости от расположения светильников различают равномерное и локализованное общее освещение. При общем равномерном освещении светильники располагаются в верхней зоне помещения равномерно, обеспечивая тем самым одинаковую освещённость всего помещения. Оно применяется, как правило, когда расположение рабочих зон при проектировании неизвестно либо при гибкой планировке. При общем локализованном освещении светильники размещают с учетом расположения технологического оборудования, создавая на отдельных поверхностях требуемый уровень освещения.

Комбинированная система освещения состоит из общего и местного освещения. Общее освещение предназначено для освещения проходов и участков, где работы не производятся, а также для выравнивания яркости в поле зрения работающих. Местное освещение обеспечивается светильниками, располагаемыми непосредственно на рабочих местах. Ему следует отдавать предпочтение, если в нескольких рабочих зонах помещения должны решаться различные зрительные задачи и поэтому для них требуются различные уровни освещённости. Оно также необходимо, когда рабочие места территориально отдалены друг от друга. При этом следует иметь в виду, что устройство только

местного освещения недопустимо, так как оно создает большую разность освещенности рабочих поверхностей и окружающего пространства, что неблагоприятно сказывается на зрении.

При учете особенностей процесса работ на компьютере допускается применение системы общего равномерно освещения.

Для общего освещения применяются газоразрядные лампы: дневной (ЛД), холодно-белой (ЛХБ), тепло-белой (ЛТБ) и белой цветности (ЛБ).

Помещение с компьютером имеет следующие параметры:

Высота помещения: $H = 350$ см;

Расстояние светильников от перекрытия: $h_c = 35$ см;

Рассчитаем высоту светильника над полом, высоту подвеса:

$$h_n = H - h_c = 350 - 35 = 315 \text{ см} \quad (5.6.1)$$

Высота рабочей поверхности над полом: $h_{\text{рп}} = 75$ см;

Рассчитаем высоту светильника над рабочей поверхностью:

$$h = h_n - h_{\text{рп}} = 315 - 75 = 260 \text{ см} \quad (5.6.2)$$

При освещении рабочего помещения двухламповыми светильниками ОД при одиночной установке или при непрерывных рядах из одиночных светильников в соответствии с требованиями наименьшая допустимая высота подвеса над полом составляет 3,5 м. Рассчитанная величина $h = 2,6$ м не соответствует требованиям.

Расстояние между соседними светильниками: $L = 3,75$ см;

Расстояние от крайних светильников до стены: $l = 0,9$ см.

Данное расстояние от крайних светильников до стены является подходящим, так как необходимая величина равна:

$$\frac{L}{3} = \frac{3,75}{3} = 1,25 \text{ м} \quad (5.6.3)$$

Интегральный критерий оптимальности расположения светильников является величина, равная:

$$\lambda = L / h \quad (5.6.4)$$

Данная величина должна составлять 1,4 при лучшем и качественном расположении светильников.

Рассчитаем оптимальное расстояние между светильниками:

$$L = \lambda \cdot h = 1,4 \cdot 2,6 = 3,64 \text{ м} \quad (5.6.5)$$

Данная величина полностью соответствует настоящему расположению светильников.

Расчет общего равномерного искусственного освещения горизонтальной рабочей поверхности выполняется методом коэффициента светового потока:

$$\phi = \frac{E_k \cdot SK_s Z}{Nn} = \frac{200 \cdot 20 \cdot 1,5 \cdot 1,1}{5 \cdot 0,49} = 2793 \text{ Лм} \quad (5.6.6)$$

Нормируемая минимальная освещенность (по СНиП 23-05-95):
 $E_n = 200 \text{ Лм}$ (разряд зрительной работы VI: очень малой точности);

Площадь освещаемого освещения: $S = 20 \text{ м}^2$;

Коэффициент запаса, учитывающий загрязнение светильника, наличие в атмосфере дыма, пыли: $K_z = 1,5$ (помещение с малым выделением пыли);

Коэффициент неравномерности освещения: $Z = 1,1$ (для люминесцентных ламп);

Число ламп в помещении: $N = 5$;

Коэффициент использования светового потока: $n = 0,49$;

Индекс помещения:

$$i = \frac{S}{h(A + B)} = \frac{20}{2,6 \cdot 10} = 0,78 \quad (5.6.7)$$

Коэффициент отражения стен (свежепобеленное состояние стен с окнами без штор): $\rho_c = 50 \%$;

Коэффициент отражения потолка (свежепобеленное состояние потолка): $\rho_n = 70 \%$;

В соответствии со значением рассчитанного светового потока $\Phi = 2793$ Лк, ближайшей световой люминесцентной лампой является лампа типа ЛХБ с электрической мощностью осветительной системы 65 Вт.

Список литературы

1. Новая философская энциклопедия: В 4 тт. М.: Мысль. Под редакцией В.С. Стёпина. 2001
2. Ohtaki H, Radhai T. Structure and dynamics of hydrated ions [J]. Chem. Rev., 2013, 93(3): 195
3. Cromer D T. Compton scattering factors for spherically symmetric free atoms [J]. J. Chem. Phys, 2012, 50(11): 4857
4. Электронный курс «Моделирование методом молекулярной динамики» [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://stud.lms.tpu.ru/course/view.php?id=1192>
5. Connétable D. et al. First-principles study of diffusion and interactions of vacancies and hydrogen in hcp-titanium // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2011. – Vol. 23. – №. 40. – P. 405401(1)- 405401(14).
6. А.О. Боев, Д.А. Аксенов, В.Н. Максименко, И.В. Неласов, А.И. Картамышев, А.Г. Липницкий, Взаимодействие атомов титана и хрома с точечными дефектами в ОЦК ванадии, Белгородский национальный исследовательский университет, Россия, 308015, г. Белгород, ул. Победы, 85
7. Y. Mishin, M.J. Mehl, D.A. Papaconstantopoulos, A.F. Voter, and J.D. Kress, "Structural stability and lattice defects in copper: *Ab initio*, tight-binding, and embedded-atom calculations," Phys. Rev. B, 63, 224106 (2001).
8. [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://ovito.org/>
9. Псахье, С.Г. Коррозионная устойчивость модифицированного кремнием никелида титана в плазме крови / С.Г. Псахье, А.И. Лотков, Л.Л. Мейснер, С.Н. Мейснер, П.В. Абрамова (Божко), А.И. Галанов, А.В. Коршунов // Известия Томского политехнического университета. – 2013. – Т. 322. – № 3. – С. 5–10.

10. Andrey I. Kartamyshev, Dat Duy Vo, and Alexey G. Lipnitskii. The interaction between light impurities and vacancies in titanium and aluminum metals: A DFT study. St. Petersburg Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics, 2(2):96{102, jun 2016.
11. Кулабухова Н.А., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Взаимодействие атома водорода с краевой дислокацией в Pd и Ni // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2014. - Т.11, №1. - С. 99-104.
12. Янилкин А.В. Моделирование диффузии водорода в гидриде циркония на основе метода квантовой молекулярной динамики // ФТТ. 2014. Т. 56. С. 1816.
13. А. С. Рохманенков, А. Ю. Куксин, А. В. Янилкин, Моделирование диффузии водорода в структурах TiH_x // Физика металлов и материаловедение, 2016, том 117, № 10, с. 1–11.